Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Cálculo de Canais Acoplados com o Modelo Generalizado de Rotação-Vibração

Daniel Felipe Morales Botero

Orientador: **Prof. Dr. Luiz Carlos Chamon**

Tese de doutorado apresentada ao Instituto de Física
como requisito parcial para a obtenção do título de
Doutor em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz Carlos Chamon (IFUSP)

Prof. Dr. Rubens Lichtenthaler Filho (IFUSP)

Prof. Dr. José Roberto B. Oliveira (IFUSP)

Prof. Dr. Antonio M. Moro (Universidad de Sevilla)

Prof. Dr. Tobias Frederico (ITA)

São Paulo
2017

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

Morales Botero, Daniel Felipe

Cálculo de canais acoplados com o modelo generalizado de rotação-vibração. São Paulo, 2017.

Tese (Doutorado) – Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Depto. de Física Nuclear

Orientador(a): Prof. Dr. Luiz Carlos Chamon
Área de Concentração: Reações Nucleares.

Unitermos: 1. Estrutura nuclear; 2. Modelo generalizado de rotação-vibração; 3. Reações nucleares; 4. Canais acoplados.

USP/IF/SBI-085/2017

Agradecimentos

Agradeço de maneira especial ao meu orientador, o professor Chamon, pela maravilhosa orientação durante o mestrado e doutorado; por fazer deste tempo de estudo e trabalho uma experiência agradável e gostosa; pelo tempo dedicado e a paciência no dia a dia; pelo exemplo que me deu como pesquisador e especialmente como pessoa. *Infinitas gracias.*

À minha esposa, pelo amor, pela companhia, pela paciência, pelo sacrifício, pelo apoio sempre...por ser meu amor.

À minha família, pelo infinito amor que me dão.

Aos meus amigos e primos, por tornar mais alegres os dias no Brasil.

A todas as pessoas que de alguma maneira contribuíram para a realização deste trabalho.

À CAPES e CNPq, pelo apoio financeiro ao longo do meu mestrado e doutorado.

E finalmente, ao povo e instituições brasileiras, pela oportunidade e apoio para estudar numa das melhores universidades do mundo e conhecer tantas pessoas que me deixaram tantas coisas boas. Obrigado pela bonita experiência de vida.

¡Gracias a todos!

Resumo

No presente trabalho, foram realizados cálculos de canais acoplados (CC) para reações nucleares que envolvem íons pesados. Nesses cálculos assumimos o Modelo Generalizado de Rotação-Vibração (GRVM), que é um modelo coletivo de estrutura nuclear desenvolvido recentemente [1]. Fizemos algumas modificações no GRVM, que tornam o modelo mais simples e consistente com o objeto de estudo. Assumimos esse modelo de estrutura nuclear para calcular as densidades de transição de carga e de matéria entre estados nucleares. Relacionamos as densidades de transição de carga teóricas com resultados experimentais de espalhamento elástico e inelástico de sistemas elétron-núcleo, o que permitiu testar a precisão do GRVM. Como mais um teste que reforça a confiabilidade do GRVM, comparamos os respectivos resultados com aqueles obtidos com o modelo de estrutura nuclear microscópico de Dirac-Hartree-Bogoliubov (DHB).

Dentro do contexto do GRVM, também foi desenvolvido o formalismo de cálculos CC. As densidades de transição, anteriormente calculadas, foram usadas para obter, com precisão, potenciais de acoplamento (próprios de cálculos CC), considerando o método de dupla-convolução descrito em [2]. Em todos esses cálculos, as densidades nucleares foram expandidas até segunda ordem na deformação e foram levados em conta valores finitos para as difusividades das densidades, os quais são desprezados na maioria dos modelos de estrutura nuclear. Foi elaborado um programa computacional para o cálculo de seções de choque de diversos processos, o qual foi utilizado na análise de dados de espalhamentos elástico e inelástico de sistemas de núcleos pesados, bem como de dados de fusão nuclear.

Abstract

In this work we perform coupled-channel (CC) calculations for nuclear reactions involving heavy-ions. In these calculations, we assume the Generalized Rotation-Vibration Model (GRVM), which is a recently developed collective model of nuclear structure [1]. We propose some modifications in the GRVM, which make the model simpler and more consistent with the subject of study. We assume this nuclear structure model to calculate the charge and matter transition densities between nuclear states. We relate the theoretical transition charge densities with experimental results of elastic and inelastic scattering for electron-nucleus systems, which allowed us to test the accuracy of the GRVM. As a further test that reinforces the reliability of the GRVM, we compare the respective results with those obtained with the Dirac-Hartree-Bogoliubov (DHB) microscopic model of nuclear structure.

Within the context of the GRVM, we have also developed the formalism of CC calculations. The earlier calculated transition densities were used to accurately obtain coupling potentials (typical of CC calculations), considering the double-folding method described in [2]. In these calculations, the nuclear densities were expanded up to second-order in the deformation, and it was taken into account finite values for the diffuseness of the densities, which are neglected in most of the nuclear structure models. A computational program was developed for the calculation of cross sections of several processes, which was used in the analysis of elastic and inelastic scattering data, as well as of fusion data, of heavy-ion systems.

Lista de Figuras

1.2.1 Representação das coordenadas usadas na construção do potencial de dupla convolução.	13
4.1.1 Fatores de forma nas aproximações PWBA e DWBA.	38
5.0.1 Densidades de carga e fatores de forma de carga, experimentais e GRVM, para o $g.s.$ e a transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$ do ^{166}Er , considerando as formas prolata e oblata. 46	
5.0.2 Densidades de transição GRVM e fatores de forma de carga GRVM e dados experimentais, para o $g.s.$ e as transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$ do ^{24}Mg , considerando as formas prolata ($\gamma_0 = 0$) e oblata ($\gamma_0 = \pi/3$).	47
5.0.3 O mesmo da figura 5.0.1, com os resultados GRVM calculados em primera e segunda ordem com os respectivos parâmetros.	48
5.0.4 O mesmo da figura 5.0.2, com os resultados GRVM calculados em primera e segunda ordem com os respectivos parâmetros.	49
5.0.5 Comparação dos cálculos teóricos da densidade de carga para o $g.s.$ e dos fatores de forma elásticos e inelásticos, para diferente valores de difusividade a , comparados com dados experimentais para o ^{28}Si	50
5.0.6 Comparação dos cálculos teóricos da densidade de carga para o $g.s.$ e dos fatores de forma elásticos e inelásticos, para diferente valores do raio R_0 , com- parados com dados experimentais para o ^{28}Si	51

5.0.7 Multipolos de transição GRVM para $2_1^+ \rightarrow 4_2^+$, $0_2^+ \rightarrow 2_2^+$, $0_2^+ \rightarrow 4_2^+$ e $3_1^- \rightarrow 3_1^-$, calculadas em primeira e segunda ordem de deformação.	52
5.0.8 Densidades de carga experimentais e GRVM, em primeira e segunda ordem, para o <i>g.s.</i> dos núcleos ^{32}S , ^{40}Ca , ^{52}Cr , ^{58}Ni e ^{70}Ge . Também são apresentados os respectivos fatores de forma elásticos calculados dentro da aproximação PWBA.	54
5.0.9 O mesmo da figura 5.0.8, para os núcleos ^{88}Sr , ^{108}Pd , ^{120}Sn , ^{152}Sm e ^{208}Pb	55
5.0.10 Densidades de carga e fatores de forma experimentais e GRVM em primeira e segunda ordem para a transição <i>g.s.</i> $\rightarrow 2_1^+$ dos núcleos ^{48}Ca , ^{64}Zn , ^{70}Ge , ^{90}Zr e ^{92}Mo	58
5.0.11 O mesmo da figura 5.0.10, para ^{110}Cd , ^{142}Nd , ^{154}Gd , ^{192}Os e ^{208}Pb	59
5.0.12 Densidades de carga e fatores de forma experimentais e GRVM, com os pa- râmetros achados considerando termos em primeira e segunda ordem, para a transição <i>g.s.</i> $\rightarrow 3_1^-$ dos núcleos ^{48}Ca , ^{92}Mo , ^{142}Nd , ^{194}Pt e ^{208}Pb	60
5.0.13 Densidades de carga e fatores de forma experimentais e GRVM, calculadas em primeira e segunda ordem, para o <i>g.s.</i> e as transições <i>g.s.</i> $\rightarrow 2_1^+$ e <i>g.s.</i> $\rightarrow 3_1^-$ do ^{16}O	61
5.0.14 Esquerda: valores de difusidade para núcleos deformados e não deformados obtidos de ajustes do GRVM em segunda ordem como função da massa nuclear A. Direita: valores de $R_0 - \Delta R_0$ para a densidade de carga como função de $Z^{1/3}$	62
6.1.1 Densidades médias do <i>g.s.</i> de carga (prótons) e matéria (nêutrons) calculados com os modelos GRVM (curva tracejada) e DHB (curva pontilhada), para os núcleos ^{40}Ca , ^{208}Pb (núcleos não deformados) e ^{108}Pd , ^{152}Sm (núcleos defor- mados).	67

7.0.1 Esquerda: densidades de transição $\rho_0^{\text{g.s.} \rightarrow \text{g.s.}}$ e $\rho_2^{\text{g.s.} \rightarrow 2_1^+}$ experimentais, GRVM em segunda ordem, (7.0.5) e (7.0.6) para o núcleo ^{166}Er . Direita: fatores de forma correspondentes às densidades do lado esquerdo da figura, calculados na aproximação PWBA.	71
8.1.1 Distribuições angulares de espalhamento elástico para o sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$. .	78
8.1.2 Distribuições angulares de espalhamento inelástico para o estado excitado $2_1^+(1.454 \text{ MeV})$ do ^{58}Ni para o sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$	79
8.1.3 Seções de choque de espalhamento elástico do sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$, para $E_{lab} = 46 \text{ MeV}$	80
8.1.4 Seções de choque de espalhamento inelástico dos estados $2_1^+(1.45 \text{ MeV})$ e $4_2^+(2.45 \text{ MeV})$ do ^{58}Ni , para $E_{lab} = 46 \text{ MeV}$	82
8.1.5 Função de excitação de fusão para o sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$	83

Lista de Tabelas

2.1	Canais de reação no contexto do GRVM.	23
5.1	Energias de excitação (em MeV) experimental (E) e teórica (T) dos estados dos núcleos considerados neste trabalho.	42
5.2	Valores dos parâmetros obtidos dentro do GRVM para os núcleos não deformados.	44
5.3	Valores dos parâmetros obtidos dentro do GRVM para os núcleos deformados.	45
5.4	Valores teóricos GRVM (T), calculados em segunda ordem, para r_{rms} , $B(E2)$ e $B(E3)$. Também são apresentados as razões entre $B(E2)$ e $B(E3)$ teórico (T) e experimental (E).	53
6.1	Esquerda: valores β_2 calculados nos modelos HFB e DHB para o caso de núcleos não deformados segundo o GRVM ($\beta_{20} = 0$). Direita: valores β_{20} do GRVM em primeira e segunda ordem (com $\gamma_0 = 0$ e $\gamma_0 = \pi/3$), comparado com os valores de β_2 dos cálculos HFB e DHB.	64
8.1	Combinações de estados inelásticos acoplados do projétil e alvo, usados na análise das figuras 8.1.3 e 8.1.4.	77

Índice

Introdução	1
1 Fundamentos: GRVM e cálculo de potenciais deformados de dupla-convolução	5
1.1 O Modelo Generalizado de Rotação-Vibração GRVM	5
1.1.1 Densidades deformadas	6
1.1.2 Funções de onda	10
1.2 O potencial deformado de dupla-convolução	12
2 Cálculo de Canais Acoplados	17
2.1 Equações acopladas	17
2.2 Potenciais de acoplamento e densidades de transição	20
2.3 Canais acoplados no contexto do GRVM	22
2.4 Condições de contorno e seções de choque	23
3 Densidades de transição e GRVM	27
3.1 Densidades de transição	27
3.2 Densidades de transição reduzidas no contexto do GRVM	30

4	Espalhamento elástico e inelástico elétron-núcleo	33
4.1	Fator de forma	34
4.2	Probabilidade de transição elétrica reduzida $B(E\lambda)$	38
5	Resultados experimentais e teóricos de espalhamento elétron-núcleo	41
6	Comparação entre alguns modelos microscópicos e o GRVM	63
6.1	Densidades GRVM e DHB	65
6.1.1	Densidades médias do g.s. no sistema de referência de laboratório . .	66
7	Efeitos de aproximações usuais em cálculos de canais acoplados, no cálculo de densidades de transição	69
8	Análises de espalhamento elástico, inelástico e de fusão através de cálculos de canais acoplados no contexto do GRVM	75
8.1	Análises de dados	75
	Conclusões e perspectivas	85
A	Densidades de transição reduzida	87
A.1	Cálculo das quantidades $\langle \phi \alpha_{\lambda 0} \phi' \rangle$ e $\langle \phi \alpha_{\lambda' \mu}^* \alpha_{\lambda'' \mu}^* \phi' \rangle$	87
A.2	Formas explícitas das densidades de transição reduzida	94
A.2.1	Densidades diagonais.	95
A.2.2	Densidades de transição para excitações desde o g.s.	97
A.2.3	Densidades de transição entre estados excitados de quadrupolo. . . .	98
A.2.4	Densidades de transição entre estados $2_{n_2}^+$ e o estado 3_1^-	100
A.3	Densidades de transição reduzida no contexto do modelo vibracional puro . .	101

A.3.1	Densidades diagonais.	101
A.3.2	Densidades de transição para excitações desde o g.s.	103
A.3.3	Densidades de transição entre estados excitados de quadrupolo. . . .	104
A.3.4	Densidades de transição entre estados $2_{n_2}^+$ e o estado 3_1^-	105
B	Fator de forma generalizado na aproximação PWBA	106
C	Seção de choque de Mott	108
D	Resolução Numérica de Equações de Canais Acoplados	110
D.1	O Método Tradicional	111
D.2	O Método Iterativo	114
D.3	O Método da Matriz R	116
D.4	O método utilizado neste trabalho	118
D.5	Procedimentos para avaliar a convergência	118
D.5.1	Convergência do Método Tradicional	119
D.5.2	Convergência do Método Iterativo	120
	Referências Bibliográficas	123

Introdução

Uma parte importante da física nuclear atual estuda o que acontece quando dois núcleos pesados colidem. Vários processos (canais) de reação podem resultar deste tipo de colisão, como por exemplo, espalhamento elástico, inelástico com excitação do alvo e/ou projétil, reações de transferência de um ou mais núcleons, quebra (*break-up*) e fusão nuclear. A abordagem teórica mais consistente e abrangente para estudar a relação entre os diversos canais de reação, a estrutura interna dos núcleos e o movimento relativo entre eles, é o formalismo de canais acoplados (CC, do inglês *Coupled-Channels*). Efeitos notáveis dos acoplamentos entre canais ocorrem na fusão de íons pesados em energias abaixo da barreira, onde as seções de choque são aumentadas em várias ordens de magnitude em relação a cálculos de penetração de barreira [3, 4, 5]. Por outro lado, dados experimentais recentes de fusão nuclear e de espalhamento elástico não têm sido descritos satisfatoriamente por cálculos CC (exemplo na Ref. [6]), podendo isso talvez ser explicado pelas aproximações e modelagens usualmente utilizadas neste tipo de cálculos [7].

O método CC é apropriado para tratar explicitamente os canais periféricos, particularmente os que estão associados a excitações coletivas. Para descrever de maneira mais completa os fenômenos envolvidos nessas colisões, é comum propor modelos de estrutura nuclear que deem conta das observações realizadas.

Existem modelos de estrutura nuclear que descrevem o núcleo considerando os movimentos dos núcleons no interior dele de maneira coletiva. Desde esse ponto de vista, muitos núcleos têm deformação permanente e, mesmo naqueles que são esféricos, os efeitos das vibrações em torno de deformações médias nulas são cruciais em cálculos CC. Nesse contexto, são tradicionalmente assumidas duas visões: o modelo vibracional puro (VM, do inglês *Vi-*

brational Model), no qual o núcleo vibra em torno de uma forma esférica média; e o modelo rotacional puro (RM, do inglês *Rotational Model*), no qual o núcleo tem uma deformação permanente em torno da qual roda. O caso em que o núcleo vibra com pequenas amplitudes em torno de uma deformação média não nula, tem sido considerado dentro do modelo de rotação-vibração proposto por Eisenberg e Greiner [8].

Os modelos rotacional e vibracional puros são assumidos na maioria das aplicações práticas de CC. Nessa visão macroscópica usual, para o cálculo do potencial coulombiano entre dois núcleos são usados modelos de densidade com difusidade nula (*sharp surface model*), os quais simplificam os cálculos mas não são muito realísticos. Um dos objetivos do presente trabalho é realizar cálculos CC com um modelo de estrutura nuclear mais aprimorado, para verificar uma possível melhora da precisão dos correspondentes resultados.

Dentro dos modelos coletivos mais aprimorados de estrutura nuclear, que visam explicar de uma melhor maneira os processos de excitação, solucionar problemas numéricos e melhorar a precisão dos cálculos, encontramos o Modelo Generalizado de Rotação-Vibração (GRVM, do inglês *Generalized Rotation-Vibration Model*) [1]. O GRVM generaliza o modelo de rotação-vibração para qualquer valor de amplitude de vibração em torno de deformações médias nulas ou não, relativas aos modos de quadrupolo e octupolo. Além disso, o GRVM leva em consideração valores finitos para a difusividade das densidades nucleares, os quais, como comentado anteriormente, são desprezados em outros modelos. De fato, em alguns casos o efeito de uma difusividade finita pode resultar numa diferença de até 50% em parâmetros envolvidos no cálculo de probabilidade de transição elétrica $B(E2)$ e $B(E3)$ [1]. Segundo o GRVM, os termos de segunda ordem na expansão da densidade também têm uma importância fundamental, já que dão origem a transições que não têm contribuições de termos de primeira ordem. Nesta tese são feitas algumas modificações na formulação original do GRVM no que respeita às funções de onda, o que faz com que o modelo seja um pouco mais simples, mas ao mesmo tempo consiga descrever corretamente os núcleos considerados no modelo original e as leis de conservação da física.

Um cálculo CC envolve a solução simultânea de várias equações acopladas, que levam em conta explicitamente os mais relevantes canais de reação [9]. Os potenciais diagonais e

de acoplamento são ingredientes fundamentais dessas equações, sendo que a parte real do potencial diagonal está relacionada com a força média entre íons, enquanto na parte imaginária está simulada a absorção de fluxo de canais que não são explicitamente considerados nas equações acopladas, como por exemplo a fusão. Os potenciais de acoplamento estão associados com as transições entre canais.

Existem vários modelos teóricos para o cálculo do potencial central íon-íon, sendo o método de dupla-convolução (*double-folding*) um dos mais usados. Porém, devido a dificuldades envolvidas nos cálculos numéricos, na maioria das aplicações relativas a cálculos CC os potenciais de acoplamento não são calculados assumindo métodos do tipo *folding*. Daqui que, como aproximação, às vezes os potenciais de acoplamento são calculados como derivadas do potencial central, através de expansões que envolvem as deformações nucleares. Foi por causa disso que, recentemente, desenvolvemos um método para o cálculo de potenciais entre núcleos deformados [2], dentro do contexto de potenciais de dupla-convolução e do GRVM, o qual é apropriado para obter potenciais de acoplamento de forma analítica. Com esse método, os potenciais são expressos como função das respectivas densidades de transição.

Por outro lado, as densidades de transição podem ser relacionadas, também, com dados de espalhamento elétron-núcleo elástico e inelástico. Há mais de 60 anos o espalhamento elétron-núcleo vem sendo usado para estudar a estrutura do núcleo, permitindo determinar as distribuições de carga nuclear do estado fundamental [10] e as densidades de transição a estados excitados. Devido à falta de estrutura do elétron e ao fato que a respectiva interação dominante (eletromagnética) é bem conhecida, o fenômeno é fácil de analisar e relacionar com os modelos de estrutura. No contexto de modelos nucleares macroscópicos (coletivos), os dados experimentais podem ser descritos através de parâmetros das densidades nucleares que podem ser ajustados (e.g. [11, 12]). Assim sendo, nesta tese usamos dados experimentais de espalhamento elétron-núcleo para ajustar os parâmetros do GRVM e testar a precisão das densidades de transição de carga calculadas com esse modelo. Adicionalmente, para testar de alguma maneira as relações assumidas no cálculo das densidades de matéria (relativo aos nêutrons) do GRVM, das quais não se possuem resultados experimentais, utilizamos os resultados teóricos obtidos do modelo microscópico de Dirac-Hartree-Bogoliugov (DHB) [13],

o qual usa cálculos de primeiros princípios e interações entre núcleons.

Finalmente, com o formalismo de CC, dentro do contexto do GRVM, totalmente desenvolvido e com as densidades de transição testadas, elaboramos um programa de cálculos CC, o *CCGRVM*, para analisar dados experimentais de processos de espalhamento elástico e inelástico para sistemas de íons pesados, bem como de fusão nuclear.

A tese está organizada da seguinte maneira: no capítulo 1 damos um breve resumo do GRVM, incluindo as modificações feitas no presente trabalho. Ainda no capítulo 1, apresentamos o método para calcular os potenciais deformados no contexto de dupla-convolução, resultados que já foram publicados anteriormente. No capítulo 2, obtemos as equações acopladas explicitamente dentro do formalismo CC. São obtidos, também, os potenciais de acoplamento e mostrada a sua relação com as densidades de transição. No capítulo 3, calculamos as densidades de transição no contexto do GRVM. No capítulo 4 é apresentada uma revisão da teoria do espalhamento elétron-núcleo. No capítulo 5 fazemos comparações entre os dados experimentais de espalhamento elétron-núcleo e os resultados teóricos obtidos neste trabalho. No capítulo 6, são comparados alguns resultados teóricos obtidos considerando modelos microscópicos de estrutura nuclear e o GRVM. Prestamos especial atenção na comparação das densidades de carga e matéria (nêutrons) nos modelos DHB e GRVM. No capítulo 7, são estudados os efeitos de algumas aproximações usualmente assumidas em cálculos de canais acoplados, particularmente quando é considerada ou não uma difusividade nula nos cálculos de densidades de transição. No capítulo 8 são mostradas algumas análises CC preliminares feitas com o programa *CCGRVM*. Finalmente, no capítulo Conclusões e perspectivas, apresentamos nossas conclusões finais e as perspectivas futuras.

Capítulo 1

Fundamentos: GRVM e cálculo de potenciais deformados de dupla-convolução

Sumário

1.1	O Modelo Generalizado de Rotação-Vibração GRVM	5
1.1.1	Densidades deformadas	6
1.1.2	Funções de onda	10
1.2	O potencial deformado de dupla-convolução	12

Neste primeiro capítulo, daremos uma breve descrição do modelo de estrutura nuclear GRVM [1], junto com as modificações introduzidas; também apresentaremos rapidamente o método de dupla-convolução usado para o cálculo dos potenciais deformados [2]. Ambos serão assumidos posteriormente nesta tese, para obter as densidades e potenciais de transição necessários em cálculos CC.

1.1 O Modelo Generalizado de Rotação-Vibração GRVM

No formalismo CC, o potencial de acoplamento entre dois estados $|m\rangle$ e $|n\rangle$ é obtido considerando as correspondentes funções de onda através de $V_{mn} = \langle m|V|n\rangle$, onde V representa a soma dos potenciais coulombiano e nuclear. Isso resulta em integrais multidimensionais

muito difíceis de serem calculadas numericamente sem nenhuma aproximação. Assim sendo, várias aproximações são usualmente feitas nesses cálculos, tanto nas funções de onda como nas interações.

Um modelo de estrutura nuclear foi proposto recentemente pensando nesse tipo de dificuldades. Esse modelo, chamado de Modelo Generalizado de Rotação-Vibração (GRVM, do inglês *Generalized Rotation-Vibration Model*) [1], trata de densidades nucleares sujeitas a vibrações de amplitude b_λ em torno de deformações médias $\beta_{\lambda 0}$. Dessa forma, os modelos rotacional ($b_\lambda = 0$) e vibracional ($\beta_{\lambda 0} = 0$) são casos particulares do GRVM. Além disso, o GRVM leva em conta os efeitos das difusividades nucleares, os quais são desconsiderados na maioria dos modelos de estrutura nuclear.

1.1.1 Densidades deformadas

No contexto dos modelos coletivos, as densidades de carga e de matéria representam um papel muito importante na descrição dos núcleos. Essas densidades podem ser descritas de maneira geral por uma função $\rho(\vec{r})$, onde $\vec{r}$ é o vetor posição de um ponto no espaço na direção $\Omega = (\theta, \phi)$, sendo que a origem do sistema de coordenadas coincide com o centro de massa do núcleo.

Quando estamos tratando com núcleos deformados, a superfície nuclear pode ser representada por uma expansão em multipolos [8, 1]:

$$R(\Omega) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega) \right], \quad (1.1.1)$$

onde $R(\Omega)$ denota o raio da superfície nuclear na direção Ω e R_0 é o raio do núcleo esférico, que é atingido quando todos os $\alpha_{\lambda\mu}$ são iguais a zero. Daqui podemos escrever a densidade nuclear de maneira geral como

$$\rho(\vec{r}) = \rho(r, \Delta), \quad (1.1.2a)$$

$$\Delta(\Omega) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega), \quad (1.1.2b)$$

onde $\Delta(\Omega)$ é a deformação na direção Ω . Aqui, $Y_{\lambda\mu}(\Omega)$ são os harmônicos esféricos e $\alpha_{\lambda\mu}$ as coordenadas de deformação no sistema de laboratório. Dado que a deformação deve ser um número real e considerando as propriedades dos harmônicos esféricos, temos que $\alpha_{\lambda\mu} = (-1)^\mu \alpha_{\lambda-\mu}^*$. Dentro do GRVM, a expansão é limitada em $\lambda = 3$, modo de octupolo, e são considerados somente termos até segunda ordem, obtendo dessa maneira um bom equilíbrio entre precisão e complexidade nas equações decorrentes.

As coordenadas de deformação no sistema de laboratório $\alpha_{\lambda\mu}$ podem ser relacionadas com as coordenadas no sistema de referência intrínseco $a_{\lambda\mu'}$ (sistema fixo no corpo que roda, útil para descrever a simetria do objeto), rodadas segundo um conjunto de ângulos $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$:

$$\alpha_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_1^{(\lambda)}, \theta_2^{(\lambda)}, \theta_3^{(\lambda)}) a_{\lambda\mu'}, \quad (1.1.3)$$

onde $D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_1^{(\lambda)}, \theta_2^{(\lambda)}, \theta_3^{(\lambda)})$ são as funções de rotação de Wigner. Essas rotações são usualmente associadas aos chamados *ângulos de Euler*, que definimos como em [8, 14]:

1. Parte-se do sistema de referência intrínseco.
2. Fazemos uma rotação $0 \leq \theta_1 \leq 2\pi$ ao redor do eixo- z , produzindo novos eixos: x', y' e z' .
3. Fazemos uma segunda rotação $0 \leq \theta_2 \leq \pi$ ao redor do novo eixo- y' . Isso produz (x'', y'', z'') .
4. Por último, fazemos uma rotação $0 \leq \theta_3 \leq 2\pi$ ao redor do novo eixo- z'' , chegando ao sistema de referência de laboratório.

Uma mudança nos ângulos de Euler denota uma rotação pura do núcleo, sem mudança na sua forma.

Usamos o índice λ em $(\theta_1^{(\lambda)}, \theta_2^{(\lambda)}, \theta_3^{(\lambda)})$ pois no GRVM os modos de quadrupolo e octupolo são totalmente independentes e, por conseguinte, os ângulos de Euler correspondentes não necessariamente coincidem.

No sistema de coordenadas intrínseco, as deformações de quadrupolo são descritas por

$$a_{20} = \beta_2 \cos \gamma, \quad (1.1.4a)$$

$$a_{2-2} = a_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta_2 \sin \gamma, \quad (1.1.4b)$$

$$a_{2-1} = a_{21} = 0. \quad (1.1.4c)$$

Para o modo octupolar é assumido que as deformações no sistema de referência intrínseco são caracterizadas somente por $a_{30} = \beta_3$, e que todos os outros $a_{3\mu} = 0$.

$$a_{30} = \beta_3, \quad (1.1.5a)$$

$$a_{3-3} = a_{33} = 0, \quad (1.1.5b)$$

$$a_{3-2} = a_{32} = 0, \quad (1.1.5c)$$

$$a_{3-1} = a_{31} = 0. \quad (1.1.5d)$$

Aqui, β_2 e β_3 são parâmetros que descrevem a magnitude da deformação, enquanto γ está associado ao grau de simetria quadrupolar na forma do núcleo.

No GRVM, α_{00} e $\alpha_{1\mu}$ são termos de segunda ordem na deformação e funções de $\alpha_{2\mu}$ e $\alpha_{3\mu}$. São calculados assumindo que o centro de massa do núcleo está fixo na origem do sistema de referência e que o volume é conservado. Então temos:

$$\alpha_{00} = - \left(\frac{\beta_2^2 + \beta_3^2}{4\sqrt{\pi}} \right) \left[\frac{\int \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \Big|_{\Delta=0} r^2 dr}{\int \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \Big|_{\Delta=0} r^2 dr} \right], \quad (1.1.6a)$$

$$\alpha_{10} = - \sqrt{\frac{3}{140\pi}} \left[\frac{\int \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \Big|_{\Delta=0} r^3 dr}{\int \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \Big|_{\Delta=0} r^3 dr} \right] \left[3\alpha_{20}\alpha_{30} + \sqrt{8}(\alpha_{21}\alpha_{31}^* + \alpha_{21}^*\alpha_{31}) + \sqrt{5}(\alpha_{22}\alpha_{32}^* + \alpha_{22}^*\alpha_{32}) \right], \quad (1.1.6b)$$

$$\alpha_{11} = \sqrt{\frac{3}{140\pi}} \left[\frac{\int \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \Big|_{\Delta=0} r^3 dr}{\int \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \Big|_{\Delta=0} r^3 dr} \right] \left[\sqrt{3}\alpha_{30}\alpha_{21} - \sqrt{6}\alpha_{20}\alpha_{31} + \alpha_{22}\alpha_{31}^* - \sqrt{10}\alpha_{21}^*\alpha_{32} - \sqrt{15}\alpha_{22}^*\alpha_{33} \right]. \quad (1.1.6c)$$

As correspondentes relações também podem ser escritas no sistema de referência intrínseco

$a_{\lambda\mu}$:

$$a_{00} = - \left(\frac{\beta_2^2 + \beta_3^2}{4\sqrt{\pi}} \right) \left[\frac{\int \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \Big|_{\Delta=0} r^2 dr}{\int \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \Big|_{\Delta=0} r^2 dr} \right], \quad (1.1.7a)$$

$$a_{10} = - \frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{35\pi}} \left[\frac{\int \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \Big|_{\Delta=0} r^3 dr}{\int \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \Big|_{\Delta=0} r^3 dr} \right] \beta_2 \beta_3 \cos \gamma, \quad (1.1.7b)$$

$$a_{11} = a_{1-1} = 0. \quad (1.1.7c)$$

A expressão (1.1.2) da densidade é válida de maneira geral para diversas formas funcionais. No GRVM foi escolhida a distribuição de Fermi para representar a densidade deformada do núcleo.

$$\rho(\vec{r}) = \rho(r, \Delta) = \frac{\epsilon_0}{1 + \exp \left(\frac{r - R_0(1 + \Delta)}{a} \right)}, \quad (1.1.8)$$

onde a é a difusividade e ϵ_0 é dado pela condição de normalização:

$$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = \begin{cases} A \\ Z \end{cases} \quad (1.1.9)$$

com $d\vec{r} = r^2 \sin \theta d\theta d\phi$. Nessa equação, usamos A (número de núcleons) para a densidade de matéria e Z (número de prótons) para a densidade de carga.

Devido à incompressibilidade da matéria nuclear, ϵ_0 vai ser calculado assumindo que o volume do núcleo não muda com a deformação. Assim, podemos assumir em (1.1.9) uma densidade esférica:

$$4\pi \epsilon_0 \int \frac{r^2}{1 + \exp \left(\frac{r - R_0}{a} \right)} dr = \begin{cases} A \\ Z \end{cases} \quad (1.1.10)$$

Em [1] foi apresentada uma sistemática dos parâmetros R_0 e a das densidades de carga dentro do contexto do GRVM, onde os valores médios tirados do ajuste são dados por (em fm):

$$R_0 = 1.67 Z^{1/3} - 0.97 + \Delta R_0, \quad \Delta R_0 = 0.57 (N^{1/3} - Z^{1/3}); \quad (1.1.11)$$

$$a = 0.50 + 0.00018 A, \quad (1.1.12)$$

onde N é o número de nêutrons do núcleo. Essas relações vão ser reajustadas um pouco mais a frente nesta tese, tendo em vista alguns resultados experimentais que não foram considerados no trabalho original.

A difusividade a é assumida ser a mesma para a densidade de carga e matéria, enquanto o raio de densidade de matéria para nêutrons, é assumido ser dado por:

$$R_0 = 1.67 N^{1/3} - 0.97 - \Delta R_0 \quad (1.1.13)$$

1.1.2 Funções de onda

Na descrição quântica de uma densidade nuclear que roda e vibra, no contexto do GRVM, são considerados separadamente os casos de quadrupolo ($\lambda = 2$) e octupolo ($\lambda = 3$). Nesse contexto, é definido um Hamiltoniano adimensional

$$\hat{H}_{\lambda dl} = \hat{H}_\lambda / \hbar w_\lambda = \hat{T}_{\lambda dl} + \hat{V}_{\lambda dl}, \quad (1.1.14)$$

onde w_λ é a frequência vibracional.

Para o Hamiltoniano do quadrupolo, o operador de energia cinética $\hat{T}_{2dl}$ é dado por

$$\begin{aligned} \hat{T}_{2dl} &= \hat{T}_{2-rot dl} + \hat{T}_{2-vib dl}, \\ &= \sum_{k=1}^3 \frac{\hat{L}_k'^2}{4\tilde{\beta}_2^2 \sin^2(\gamma - \frac{2k\pi}{3})} - \left[\frac{1}{\tilde{\beta}_2^4} \frac{\partial}{\partial \tilde{\beta}_2} \tilde{\beta}_2^4 \frac{\partial}{\partial \tilde{\beta}_2} + \frac{1}{\tilde{\beta}_2^2 \sin(3\gamma)} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin(3\gamma) \frac{\partial}{\partial \gamma} \right], \end{aligned} \quad (1.1.15)$$

enquanto, para o octupolo, $\hat{T}_{3dl}$ é dado por

$$\hat{T}_{3dl} = - \left(\frac{\partial^2}{\tilde{\beta}_3^2} + \frac{2}{\tilde{\beta}_3} \frac{\partial}{\partial \tilde{\beta}_3} + \frac{1}{6\tilde{\beta}_3^2} \left[\frac{\partial^2}{\theta_2^2} + \cot \theta_2 \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \csc^2 \theta_2 \frac{\partial^2}{\theta_2^2} \right] \right). \quad (1.1.16)$$

Por outro lado, os operadores de energia potencial são dados por

$$\hat{V}_{2dl} = \frac{1}{4} \left[\left(\tilde{\beta}_2 \cos \gamma - \tilde{\beta}_{20} \cos \gamma_0 \right)^2 + \left(\tilde{\beta}_2 \sin \gamma - \tilde{\beta}_{20} \sin \gamma_0 \right)^2 \right], \quad (1.1.17)$$

$$\hat{V}_{3dl} = \frac{1}{4}(\tilde{\beta}_3 - \tilde{\beta}_{30})^2. \quad (1.1.18)$$

Nessas equações, $\tilde{\beta}_\lambda = \beta_\lambda/b_\lambda$ é “adimensional”, onde β_λ é a deformação e b_λ é a amplitude de vibração em torno da deformação média.

Para um dado núcleo, os valores de $\tilde{\beta}_{20}$, γ_0 e $\tilde{\beta}_{30}$ são fixos e se relacionam com as deformações médias, em torno das quais o núcleo vibra com amplitudes b_2 e b_3 . O modelo rotacional é descrito no GRVM quando $\beta_{\lambda 0} \gg b_\lambda$, que corresponde a valores de $\tilde{\beta}_{\lambda 0} \gg 1$. Por outro lado, o modelo vibracional é obtido quando $\beta_{\lambda 0} \ll b_\lambda$, obtendo dessa maneira valores de $\tilde{\beta}_{\lambda 0} \approx 0$. Assim, o GRVM dá conta de qualquer situação entre esses dois casos extremos, sendo um modelo geral nesse sentido.

O objeto de estudo do GRVM são núcleos par-par com estado fundamental (*g.s.*, do inglês *ground-state*) 0^+ . Devido à paridade positiva, a expansão multipolar da densidade nuclear (média) do *g.s.*, no sistema de referência intrínseco, não deveria conter termos de paridade ímpar. Adicionalmente, a densidade do *g.s.* deveria ter uma simetria azimutal. Com o intuito de levar esses pontos em consideração, estamos propondo duas modificações no GRVM: 1) impor $\tilde{\beta}_{30} = 0$; com isso, o modo de octupolo fica sendo vibracional puro. 2) limitar a deformação média relacionada com o modo de quadrupolo a uma forma prolata ou oblata pura; significando isso que somente vão ser aceitos dois valores para γ_0 : 0 ou $\pi/3$.

A função de onda completa correspondente aos números quânticos n_2 , I_2 e n_3 , I_3 , para o quadrupolo e octupolo respectivamente, com spin I e projeção M , pode ser escrita como uma superposição das duas auto-funções particulares obtidas dos Hamiltonianos $\hat{H}_{\lambda dl}$, com um peso dado pelos Clebsch-Gordan que acoplam os spins I_2 e I_3 dando um spin total I .

$$\phi_{n_2, I_2, n_3, I_3; IM}(\tilde{\beta}_2, \gamma, \tilde{\beta}_3, \Omega_2, \Omega_3) = \sum_{M_2} \sum_{M_3} C_{M_2 M_3 M}^{I_2 I_3 I} \phi_{n_2, I_2, M_2}^{(2)}(\tilde{\beta}_2, \gamma, \Omega_2) \phi_{n_3, I_3, M_3}^{(3)}(\tilde{\beta}_3, \Omega_3), \quad (1.1.19)$$

A função de onda particular do modo de quadrupolo é escrita como:

$$\phi_{n_2 I_2 M_2}^{(2)} = \sum_{K_2=0}^{I_2} \chi_{n_2 I_2 K_2}^{(2)}(\tilde{\beta}_2, \gamma) \left(1 - \frac{\delta_{K_2 0}}{2}\right) [|I_2 M_2 K_2\rangle + (-1)^{I_2} |I_2 M_2 - K_2\rangle] \quad (1.1.20)$$

sendo

$$|I_2 M_2 K_2\rangle = \sqrt{\frac{2I_2 + 1}{8\pi^2}} D_{M_2 K_2}^{I_2*}(\theta_1^{(2)}, \theta_2^{(2)}, \theta_3^{(2)}) \quad (1.1.21)$$

Para o modo de octupolo, a função de onda é escrita como:

$$\phi_{n_3 I_3 M_3}^{(3)} = \chi_{n_3 I_3}^{(3)}(\tilde{\beta}_3) Y_{I_3 M_3}(\theta_2^{(3)}, \theta_1^{(3)}) \quad (1.1.22)$$

As funções $\chi_{n_2 I_2 K_2}(\tilde{\beta}_2, \gamma)$ e suas respectivas auto-energias são obtidas no modelo GRVM fazendo uma expansão na base das auto-funções do modelo vibracional, conforme [1] e referências ali contidas. Para o modo de octupolo, considerando já $\tilde{\beta}_{30} = 0$, as funções $\chi_{n_3 I_3}(\tilde{\beta}_3)$ são as mesmas do modelo vibracional puro:

$$\chi_{00}^{(3)} = \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} e^{-\tilde{\beta}_3^2/4}, \quad (1.1.23a)$$

$$\chi_{13}^{(3)} = \frac{\sqrt{3}}{3} \left(\frac{1}{2\pi}\right)^{1/4} \tilde{\beta}_3 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4}. \quad (1.1.23b)$$

As funções de onda $\phi_{n_2, I_2, M_2}^{(2)}(\tilde{\beta}_2, \gamma, \Omega_2)$ e $\phi_{n_3, I_3, M_3}^{(3)}(\tilde{\beta}_3, \Omega_3)$ são normalizadas levando em consideração os elementos de volume de quadrupolo e octupolo: $d\zeta_\lambda = d\tau_\lambda d\Omega_\lambda$, onde $d\Omega_\lambda$ representa o elemento de volume relacionado com os ângulos de Euler. Podemos escrever explicitamente cada um desses termos como:

$$d\tau_2 = \frac{3}{\sqrt{2}} \tilde{\beta}_2^4 \sin(3\gamma) d\tilde{\beta}_2 d\gamma, \quad (1.1.24a)$$

$$d\Omega_2 = \sin \theta_2^{(2)} d\theta_1^{(2)} d\theta_2^{(2)} d\theta_3^{(2)}, \quad (1.1.24b)$$

$$d\tau_3 = \tilde{\beta}_3^2 d\tilde{\beta}_3, \quad (1.1.24c)$$

$$d\Omega_3 = \sin \theta_2^{(3)} d\theta_1^{(3)} d\theta_2^{(3)}. \quad (1.1.24d)$$

onde $\beta_2 \geq 0$, $0 \leq \gamma \leq \frac{\pi}{3}$ e, devido às mudanças feitas no modelo, para a deformação de octupolo temos $-\infty \leq \beta_3 \leq \infty$.

1.2 O potencial deformado de dupla-convolução

Recentemente, foi apresentado um método para calcular potenciais entre dois núcleos deformados [2] usando o modelo de dupla-convolução [15]. Esse trabalho foi o resultado dos meus

estudos de mestrado junto ao IFUSP. O leitor interessado nos detalhes do trabalho é convidado a consultar a dissertação “Cálculo de potenciais deformados no contexto do modelo generalizado de rotação-vibração”. A seguir daremos um resumo dos aspectos mais relevantes do método.

De forma geral, o potencial de dupla-convolução é escrito como:

$$V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) = \int \rho_1(\vec{r}_1, \xi_1) \rho_2(\vec{r}_2, \xi_2) v(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.2.1)$$

onde $\vec{R}$ é o vetor posição do centro de massa de um núcleo em relação ao outro e, portanto, descreve o movimento relativo (vide figura 1.2.1). ξ_1 e ξ_2 representam o conjunto total de coordenadas de deformação, as quais estão embutidas nas densidades ρ_1 e ρ_2 (1 e 2 indicando projétil e alvo de maneira geral). O termo $v(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ é o potencial de interação entre dois elementos infinitesimais de volume nas posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$. No caso do potencial nuclear, $v(\vec{r})$ é associado à interação efetiva nêutron-nêutron. Nos nossos cálculos, vamos assumir o potencial de São Paulo [16], que, para baixas energias, é dado por $v(\vec{r}) = V_0 \delta(\vec{r})$, com $V_0 = -456 \text{ MeV fm}^3$. Para o potencial coulombiano, $v(\vec{r}) = e^2/r$.

Figura 1.2.1: Representação das coordenadas usadas na construção do potencial de dupla-convolução.

A expressão (1.2.1) pode ser trabalhada no espaço de momentos, aplicando a transformada de Fourier aos potenciais de interação

$$\tilde{v}(\vec{k}) = \int v(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r}, \quad (1.2.2)$$

$$v(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \tilde{v}(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k}. \quad (1.2.3)$$

Com isso, $V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2)$ pode ser escrita como

$$V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) = \frac{1}{8\pi^3} \int \tilde{v}(\vec{k}) \rho_1(\vec{r}_1, \xi_1) \rho_2(\vec{r}_2, \xi_2) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1)} d\vec{k} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (1.2.4)$$

onde

$$\tilde{v}(\vec{k}) = 4\pi e^2 / k^2 \quad \text{para o potencial de Coulomb,} \quad (1.2.5a)$$

$$\tilde{v}(\vec{k}) = V_0 \quad \text{para o potencial de São Paulo.} \quad (1.2.5b)$$

Agora, fazendo uso da expansão da onda plana em ondas parciais

$$e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{\lambda\mu} i^\lambda j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_k) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) \quad (1.2.6)$$

onde $j_\lambda(kr)$ são as funções esféricas de Bessel, obtemos:

$$V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) = \sum_{\lambda\mu} V_{\lambda\mu}(R, \xi_1, \xi_2) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_R) = \sum_{\lambda\mu} V_{\lambda\mu}^*(R, \xi_1, \xi_2) Y_{\lambda\mu}(\Omega_R), \quad (1.2.7)$$

sendo

$$V_{\lambda\mu}(R, \xi_1, \xi_2) = 8 \sum_{\lambda_1\mu_1} \sum_{\lambda_2\mu_2} i^{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda} \sqrt{\frac{(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)}{4\pi(2\lambda + 1)}} C_{\mu_1\mu_2\mu}^{\lambda_1\lambda_2\lambda} C_{0\ 0\ 0}^{\lambda_1\lambda_2\lambda} \times \int \tilde{v}(k) j_\lambda(kR) M_{\lambda_1\mu_1}^{(1)}(k, \xi_1) M_{\lambda_2\mu_2}^{(2)}(k, \xi_2) k^2 dk, \quad (1.2.8)$$

com

$$M_{\lambda\mu}^{(i)}(k, \xi_i) = \int \rho_i(\vec{r}, \xi_i) j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\vec{r}. \quad (1.2.9)$$

sendo que

$$\rho_{\lambda\mu}(r, \xi) = \int \rho(\vec{r}, \xi) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r, \quad (1.2.10)$$

onde $\rho_{\lambda\mu}(r, \xi_i)$ é chamado de *densidade de multipolo*. Daqui podemos escrever (1.2.9) como:

$$M_{\lambda\mu}(k, \xi) = \int \rho_{\lambda\mu}(r, \xi) j_\lambda(kr) r^2 dr. \quad (1.2.11)$$

Assim sendo, o potencial de dupla-convolução pode ser calculado sem aproximações, para densidades deformadas, integrando diretamente a equação (1.2.1) ou usando a transformada de Fourier nas equações (1.2.7)-(1.2.11). Não obstante, os tempos computacionais decorrentes

de cálculos de potenciais de acoplamento para aplicações em cálculos CC são consideráveis e tornam inviáveis o cálculo sem nenhuma aproximação. Assim sendo, dentro do GRVM e do método aqui usado para obter os potenciais, são assumidas algumas aproximações.

Dessa forma, as densidades (1.1.8) são expandidas até segunda ordem na deformação:

$$\rho(\vec{r}) \approx \rho_{nd}(r) + (\Delta_1 + \Delta_2) \left. \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \right|_{\Delta=0} + \frac{\Delta_3}{2} \left. \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta=0}, \quad (1.2.12)$$

com

$$\Delta_1 = \sum_{\lambda=2}^3 \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega_r), \quad (1.2.13a)$$

$$\Delta_2 = \sum_{\lambda=0}^1 \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega_r), \quad (1.2.13b)$$

$$\Delta_3 = \sum_{\lambda=2}^3 \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \sum_{\lambda'=2}^3 \sum_{\mu'=-\lambda'}^{\lambda'} \alpha_{\lambda\mu}^* \alpha_{\lambda'\mu'}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) Y_{\lambda'\mu'}(\Omega_r). \quad (1.2.13c)$$

onde $\rho_{nd}(r)$ é a densidade não deformada, que corresponde à equação (1.1.8) fazendo $\Delta = 0$. Nas equações acima, Δ_1 é um termo de primeira ordem na deformação, enquanto Δ_2 e Δ_3 são termos de segunda ordem.

Agora, lembrando que no GRVM foi assumida uma distribuição de Fermi para a densidade, as derivadas com respeito às deformações são dadas explicitamente por:

$$\rho_{nd}(r) \equiv \rho(r, \Delta) \Big|_{\Delta=0} = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)}, \quad (1.2.14a)$$

$$\left. \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \right|_{\Delta=0} = \frac{\rho_0 R_0}{a} \frac{\exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)}{\left[1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)\right]^2}, \quad (1.2.14b)$$

$$\left. \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta=0} = \frac{\rho_0 R_0^2}{a^2} \frac{\exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right) \left[\exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right) - 1 \right]}{\left[1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)\right]^3}. \quad (1.2.14c)$$

Com o intuito de simplificar as expressões, daqui para a frente vamos assumir a seguinte notação nas derivadas da densidade:

$$\begin{aligned} \partial \rho(r) &= \left. \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \right|_{\Delta=0}, \\ \partial^2 \rho(r) &= \left. \frac{\partial^2 \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta^2} \right|_{\Delta=0}. \end{aligned} \quad (1.2.15)$$

Com isso, podemos reescrever $M_{\lambda\mu}$ da equação (1.2.9) como:

$$M_{\lambda\mu}(k, \xi) = \delta_{\lambda 0} I^{(0)}(k) + \alpha_{\lambda\mu} I_{\lambda}^{(1)}(k) + (-1)^{\mu} I_{\lambda}^{(2)}(k) \times \\ \sum_{\lambda'\mu'} \sum_{\lambda''\mu''} \alpha_{\lambda'\mu'}^* \alpha_{\lambda''\mu''}^* \sqrt{\frac{(2\lambda' + 1)(2\lambda'' + 1)}{4\pi(2\lambda + 1)}} C_{\mu' \mu'' - \mu}^{\lambda' \lambda'' \lambda} C_{0 \ 0 \ 0}^{\lambda' \lambda'' \lambda}, \quad (1.2.16)$$

sendo

$$I^{(0)}(k) = \sqrt{4\pi} \int j_0(kr) \rho_{nd}(r) r^2 dr, \quad (1.2.17a)$$

$$I_{\lambda}^{(1)}(k) = \int j_{\lambda}(kr) \partial \rho(r) r^2 dr, \quad (1.2.17b)$$

$$I_{\lambda}^{(2)}(k) = \frac{1}{2} \int j_{\lambda}(kr) \partial^2 \rho(r) r^2 dr. \quad (1.2.17c)$$

Desta maneira, o potencial de dupla-convolução é calculado através das equações (1.2.7), (1.2.8) e (1.2.16), sendo explicita, desta vez, a relação entre o potencial deformado e os parâmetros de deformação nuclear $\alpha_{\lambda\mu}$ em (1.2.16), o que não acontece em (1.2.9). Essa característica é muito importante para calcular os potenciais de acoplamento de uma maneira mais simples, como será explicado em outro capítulo.

Essas aproximações já foram testadas no cálculo de potenciais entre núcleos deformados e comparados com os valores calculados de maneira exata [2]. Os resultados obtidos foram bem satisfatórios e com um menor tempo de cálculo computacional.

Capítulo 2

Cálculo de Canais Acoplados

Sumário

2.1	Equações acopladas	17
2.2	Potenciais de acoplamento e densidades de transição	20
2.3	Canais acoplados no contexto do GRVM	22
2.4	Condições de contorno e seções de choque	23

2.1 Equações acopladas

Vamos considerar a colisão de dois núcleos. O Hamiltoniano total do sistema contém a energia cinética do movimento relativo projétil-alvo, os Hamiltonianos nucleares intrínsecos $\hat{h}_1$ e $\hat{h}_2$ do projétil e do alvo, bem como o termo de energia potencial entre os núcleos:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_{\vec{R}}^2\Psi + \left[\hat{h}_1(\xi_1) + \hat{h}_2(\xi_2)\right]\Psi + V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2)\Psi = E_T\Psi \quad (2.1.1)$$

onde $\vec{R} = (R, \Omega_R)$ é o vetor que descreve o movimento relativo entre os centros de massa dos núcleos, μ é a massa reduzida do sistema e E_T a energia total no sistema de centro de massa. ξ_1 e ξ_2 representam, genericamente, todas as coordenadas relacionadas com as deformações do projétil e do alvo. $V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2)$ representa a energia potencial entre os dois núcleos, sendo a soma dos potenciais coulombiano e nuclear, $V_C(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) + V_N(\vec{R}, \xi_1, \xi_2)$, os quais dependem das deformações nucleares e da distância entre os centros de massa.

O operador $\nabla_{\vec{R}}^2$ é escrito em coordenadas esféricas como:

$$\begin{aligned}\nabla_{\vec{R}}^2 &= \frac{1}{R^2} \frac{\partial}{\partial R} \left(R^2 \frac{\partial}{\partial R} \right) - \frac{1}{R^2} \frac{1}{\hbar^2} L^2(\theta, \phi); \\ L^2(\theta, \phi) &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right]\end{aligned}\quad (2.1.2)$$

A função de onda total do sistema, $\Psi(\vec{R}, \xi_1, \xi_2)$, é expandida em termos das auto-funções de momento angular ψ_J^M , sendo J o momento angular total do sistema, com componente M na direção do eixo- z :

$$\Psi(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) = \sum_{JM} a_{JM} \psi_J^M(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) \quad (2.1.3)$$

os coeficientes a_{JM} são determinados pelas condições do canal de entrada.

Vamos assumir que, antes da colisão, os dois núcleos estão no seu respectivo estado fundamental ($g.s.$), o qual para núcleos par-par (os considerados no GRVM) é dado por estados com spin 0^+ . Adicionalmente, vamos assumir o eixo- z na direção e sentido do feixe. Nessas condições, a projeção do momento angular total J no eixo- z é nula, ou seja, $M = 0$. Para simplificar a notação, M não vai ser mais escrito nas expressões a seguir. Nesse caso a somatória sobre M em (2.1.3) desaparece e podemos escrever a_J como

$$a_J = \frac{1}{Rk} \sqrt{4\pi(2J+1)} e^{i\sigma_J} \quad (2.1.4)$$

sendo $k = \frac{\sqrt{2\mu E_{cm}}}{\hbar}$ o número de onda relacionado com o canal elástico, $E_{c.m.} = E_T - \epsilon_{g.s.}$, onde $\epsilon_{g.s.}$ é a soma das energias dos $g.s.$ do projétil e do alvo. σ_J é a defasagem de Coulomb no canal elástico.

Para fazer a expansão da função de onda total, vamos levar em consideração os acoplamentos dos diferentes momentos angulares do sistema, onde o momento angular total é a soma do momento angular orbital $\vec{L}$ e o spin total $\vec{I}$. O spin total corresponde à soma dos spins de ambos núcleos.

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{I}; \quad \vec{I} = \vec{I}_1 + \vec{I}_2. \quad (2.1.5)$$

Assim, para cada onda parcial J , a função de onda pode ser expandida em termos das funções de onda intrínsecas dos núcleos $\phi_{\eta_1 I_1 M_1}(\xi_1)$ e $\phi_{\eta_2 I_2 M_2}(\xi_2)$:

$$\psi_J(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) = \sum_{L,I} \sum_{\eta_1 I_1} \sum_{\eta_2 I_2} \Phi_{L,I}^{(\eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(\xi_1, \xi_2, \Omega_R) f_{L,I; \eta_1 I_1; \eta_2 I_2}(R), \quad (2.1.6)$$

$$\Phi_{L,I}^{(\eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(\xi_1, \xi_2, \Omega_R) = i^L \sum_{M_I M_L} C_{M_I M_L 0}^{I \ L \ J} Y_{LM_L}(\Omega_R) \varphi_{IM_I}^{(\eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(\xi_1, \xi_2), \quad (2.1.7)$$

$$\varphi_{IM_I}^{(\eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(\xi_1, \xi_2) = \sum_{M_1 M_2} C_{M_1 M_2 M_I}^{I_1 \ I_2 \ I} \phi_{\eta_1 I_1 M_1}(\xi_1) \phi_{\eta_2 I_2 M_2}(\xi_2), \quad (2.1.8)$$

onde η_1 e η_2 representam todos os números quânticos, com exceção do spin, que estão relacionados com os estados intrínsecos dos dois núcleos. Nas equações acima, $f_{L,I;\eta_1 I_1; \eta_2 I_2}(R)$ representa as funções de onda radiais do sistema. O fator (opcional) i^L é incluído para simplificar a expansão em funções de Bessel esféricas da onda plana incidente. Os coeficientes de Clebsch-Gordan garantem a conservação do momento angular total. Para cada núcleo, as funções de onda intrínsecas obedecem a relação:

$$\hat{h} \phi_{\eta IM} = \epsilon_{\eta IM} \phi_{\eta IM}, \quad (2.1.9)$$

sendo $\epsilon_{\eta IM}$ a auto-energia correspondente a cada estado com auto-função $\phi_{\eta IM}$.

O procedimento para obter as equações diferenciais acopladas é descrito a seguir (vide [17]). A função de onda (2.1.6) é substituída na equação (2.1.3), e essa, por sua vez, é substituída na equação de Scrödinger (2.1.1) e operamos. A equação resultante é multiplicada por uma função Φ^* particular, com energia de excitação E^* , e é feita uma integração sobre as variáveis angulares Ω_R e as coordenadas intrínsecas (ξ_1, ξ_2) . Levando em consideração a ortogonalidade das funções de onda intrínsecas e dos harmônicos esféricos, esses cálculos dão como resultado:

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} \right) - (E_{c.m.} - E^*) \right] f_{L,I;\eta_1 I_1; \eta_2 I_2}(R) + \\ & (-i)^L \sum_{\eta'_1 I'_1} \sum_{\eta'_2 I'_2} \sum_{L' I'} \sum_{M'_I M'_L} \sum_{M_I M_L} i^{L'} C_{M'_I M'_L 0}^{I' \ L' \ J} C_{M_I M_L 0}^{I \ L \ J} \langle \varphi | V_{LM_L \ L' M'_L} | \varphi' \rangle (R) \times \\ & f_{L',I'; \eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2}(R) = 0, \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Daqui podemos definir:

$$U_{L',I'; \eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2}^{(L,I; \eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(R) = i^{L+L'} \sum_{M'_I M'_L} \sum_{M_I M_L} C_{M'_I M'_L 0}^{I' \ L' \ J} C_{M_I M_L 0}^{I \ L \ J} \langle \varphi | V_{LM_L \ L' M'_L} | \varphi' \rangle (R) \quad (2.1.11)$$

onde

$$\begin{aligned} \langle \varphi | V_{LM_L L' M'_L} | \varphi' \rangle (R) &\equiv \sum_{M'_1 M'_2} \sum_{M_1 M_2} C_{M'_1 M'_2 M'_I}^{I'_1 I'_2 I'} C_{M_1 M_2 M_I}^{I_1 I_2 I} \int \phi_{\eta_1 I_1 M_1}^*(\xi_1) \times \\ &\phi_{\eta_2 I_2 M_2}^*(\xi_2) V_{LM_L L' M'_L}(R, \xi_1, \xi_2) \phi_{\eta'_1 I'_1 M'_1}(\xi_1) \phi_{\eta'_2 I'_2 M'_2}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2, \end{aligned} \quad (2.1.12)$$

$$V_{LM_L L' M'_L}(R, \xi_1, \xi_2) \equiv \int Y_{LM_L}^*(\Omega_R) V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2) Y_{L' M'_L}(\Omega_R) d\Omega_R. \quad (2.1.13)$$

Assumindo o modelo *folding*, na equação (1.2.1) ou nas equações (1.2.7)-(1.2.9) para o potencial, o cálculo das componentes diagonais (centrais) e de fora da diagonal (acoplamentos), na equação (2.1.12), envolve integrais multidimensionais que devem ser calculadas com integração sobre todas as coordenadas intrínsecas (de deformação), incluindo os ângulos de Euler, para os estados dos dois núcleos; além de $d\Omega_R$, $d\vec{r}_1$ e $d\vec{r}_2$. O cálculo numérico de tais integrais com número muito grande de dimensões é inviável na prática. Portanto, aproximações são necessárias em cálculos CC, tanto no modelo de estrutura nuclear quanto nas funções de onda, tais que seja possível obter resultados de forma analítica, pelo menos parcialmente. Na seção seguinte, mostraremos como calcular os potenciais de acoplamento de forma aproximada.

2.2 Potenciais de acoplamento e densidades de transição

Para começar, vamos usar a equação (1.2.7) para expressar $V(\vec{R}, \xi_1, \xi_2)$ no cálculo do potencial deformado de dupla-convolução, que é inserido na equação (2.1.13) para calcular os potenciais de acoplamento. Lembrando a propriedade da integral de três harmônicos esféricos:

$$\int Y_{\lambda\mu}(\Omega) Y_{\lambda_1\mu_1}^*(\Omega) Y_{\lambda_2\mu_2}^*(\Omega) d\Omega = \sqrt{\frac{(2\lambda_1+1)(2\lambda_2+1)}{4\pi(2\lambda+1)}} C_{\mu_1\mu_2\mu}^{\lambda_1\lambda_2\lambda} C_{0\ 0\ 0}^{\lambda_1\lambda_2\lambda}, \quad (2.2.1)$$

e a definição (2.1.11), a equação (2.1.10) é reescrita como:

$$\begin{aligned} &\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} \right) - (E_{c.m.} - E^*) \right] f_{L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2}(R) + \\ &\sum_{L'I'} \sum_{\eta'_1 I'_1} \sum_{\eta'_2 I'_2} U_{L',I';\eta'_1 I'_1;\eta'_2 I'_2}^{(L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2)}(R) f_{L',I';\eta'_1 I'_1;\eta'_2 I'_2}(R) = 0, \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

sendo

$$U_{L',I';\eta'_1 I'_1;\eta'_2 I'_2}^{(L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2)}(R) = (-1)^L i^{L+L'} \sqrt{\frac{2L+1}{2L'+1}} \sum_{M_I M_L} \sum_{M'_I M'_L} C_{M_I M_L 0}^{I L J} C_{M'_I M'_L 0}^{I' L' J} \times \sum_{\lambda\mu} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} C_{0 0 0}^{L \lambda L'} C_{M_L \mu M'_L}^{L \lambda L'} \langle \varphi | V_{\lambda\mu} | \varphi' \rangle, \quad (2.2.3)$$

onde

$$\langle \varphi | V_{\lambda\mu} | \varphi' \rangle = \sum_{M_1 M_2} \sum_{M'_1 M'_2} C_{M_1 M_2 M_I}^{I_1 I_2 I} C_{M'_1 M'_2 M'_I}^{I'_1 I'_2 I'} \times \int \phi_{\eta_1; I_1 M_1}^*(\xi_1) \phi_{\eta_2; I_2 M_2}^*(\xi_2) V_{\lambda\mu}(R, \xi_1, \xi_2) \phi_{\eta'_1; I'_1 M'_1}(\xi_1) \phi_{\eta'_2; I'_2 M'_2}(\xi_2) d\xi_1 d\xi_2. \quad (2.2.4)$$

Substituindo $V_{\lambda\mu}(R, \xi_1, \xi_2)$ da equação (1.2.8) na equação (2.2.4) acima, obtemos que:

$$\begin{aligned} \langle \varphi | V_{\lambda\mu} | \varphi' \rangle &= 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2} i^{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda} \sqrt{\frac{(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)}{4\pi (2\lambda + 1)}} C_{0 0 0}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \\ &\times \sum_{M_1 M_2} \sum_{M'_1 M'_2} C_{M_1 M_2 M_I}^{I_1 I_2 I} C_{M'_1 M'_2 M'_I}^{I'_1 I'_2 I'} \\ &\times \int \tilde{v}(k) \langle \phi | M_{\lambda_1 \mu_1} | \phi' \rangle^{(1)} \langle \phi | M_{\lambda_2 \mu_2} | \phi' \rangle^{(2)} j_\lambda(kR) k^2 dk, \end{aligned} \quad (2.2.5)$$

onde

$$\langle \phi | M_{\lambda_i \mu_i} | \phi' \rangle^{(i)} = \int \phi_{\eta_i; I_i M_i}^*(\xi_i) M_{\lambda_i \mu_i}^{(i)}(k, \xi_i) \phi_{\eta'_i; I'_i M'_i}(\xi_i) d\xi_i, \quad (2.2.6)$$

com $M_{\lambda\mu}^{(i)}$ dado pela equação (1.2.11). Os índices ⁽¹⁾ and ⁽²⁾ indicam cálculos relacionados ao projétil e ao alvo.

De (1.2.11) e (2.2.6) temos que:

$$\langle \phi | M_{\lambda\mu} | \phi' \rangle^{(i)} = \int \langle \phi | \rho_{\lambda\mu}(r) | \phi' \rangle^{(i)} j_\lambda(kr) r^2 dr. \quad (2.2.7)$$

onde os termos $\langle \phi | \rho_{\lambda\mu}(r) | \phi' \rangle$ vão ser chamados de *elementos da matriz de densidade de tran-*

sição. Com isso podemos escrever $\langle \varphi | V_{\lambda\mu} | \varphi' \rangle$ finalmente como:

$$\begin{aligned}
\langle \varphi | V_{\lambda\mu} | \varphi' \rangle &= 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2} i^{\lambda_1 - \lambda_2 - \lambda} \sqrt{\frac{(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)}{4\pi(2\lambda + 1)}} C_{0 \ 0 \ 0}^{\lambda_1 \ \lambda_2 \ \lambda} \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \ \mu_2 \ \mu}^{\lambda_1 \ \lambda_2 \ \lambda} \\
&\times \sum_{M_1 M_2} \sum_{M'_1 M'_2} C_{M_1 M_2 M_I}^{I_1 \ I_2 \ I} C_{M'_1 M'_2 M'_I}^{I'_1 \ I'_2 \ I'} \\
&\times \left[\int \tilde{v}(k) \left(\int \langle \phi | \rho_{\lambda_1 \mu_1}(r) | \phi' \rangle^{(1)} j_{\lambda_1}(kr_1) r_1^2 dr_1 \right) \right. \\
&\quad \left. \times \left(\int \langle \phi | \rho_{\lambda_2 \mu_2}(r) | \phi' \rangle^{(2)} j_{\lambda_2}(kr_2) r_2^2 dr_2 \right) j_{\lambda}(kR) k^2 dk \right].
\end{aligned} \tag{2.2.8}$$

Daqui fica clara, dentro do contexto dos potenciais de dupla-convolução, a relação entre os potenciais de acoplamento em cálculos CC e as densidades de transição. No próximo capítulo serão apresentados os cálculos de densidades de transição dentro do GRVM.

2.3 Canais acoplados no contexto do GRVM

Um cálculo CC envolve, então, a solução das equações acopladas dadas por (2.2.2), com potenciais de transição calculados com as expressões (2.2.3) e (2.2.8). Para dar conta dos canais não incluídos no cálculo CC (basicamente fusão), vamos acrescentar um potencial imaginário, $iW(R)$, à parte diagonal do potencial nuclear, onde $W(R)$ vai ser assumido como um potencial do tipo de Woods-Saxon.

No contexto do GRVM, os estados $\phi_{\eta IM}$ do núcleo estão associados às funções $\phi_{n_2, I_2, n_3, I_3; IM}$ de (1.1.19). Com isso, o conjunto de números quânticos e coordenadas intrínsecas corresponde a: $\eta \rightarrow n_2, I_2; n_3, I_3, \xi \rightarrow \beta_2, b_2, \gamma, \Omega_2; \beta_3, b_3, \Omega_3$.

Dado que a função de onda (2.1.6) é muito geral (o que resultaria num número enorme de equações acopladas), devemos impor algumas restrições na análise que faremos posteriormente em nossos cálculos CC. Além do *g.s.*, os estados nucleares descritos no GRVM são: o primeiro estado 2_1^+ , o tripleto $0_2^+, 2_2^+, 4_2^+$ - todos esses associados com a deformação de quadrupolo- e os estados *g.s.* e 3_1^- associados com a deformação de octupolo. Vamos assumir que não há excitação de quadrupolo e octupolo de maneira simultânea e que também não

temos excitação mútua (dos dois núcleos de maneira simultânea). Dessa forma, os valores que podem ser obtidos da soma dos spins dos dois núcleos vão ser $I = 0, 2, 4$ ou 3 . Os auto-estados do sistema a trabalhar são então somente aqueles mostrados na tabela 2.1.

	Projétil		Alvo		I	n	M
	$\lambda = 2$	$\lambda = 3$	$\lambda = 2$	$\lambda = 3$			
elástico	g.s.	g.s.	g.s.	g.s.	0	0	0
2_1^+ projétil	2_1^+	g.s.	g.s.	g.s.	2	1	$-2 \leq M \leq 2$
2_1^+ alvo	g.s.	g.s.	2_1^+	g.s.	2	1	$-2 \leq M \leq 2$
0_2^+ projétil	0_2^+	g.s.	g.s.	g.s.	0	2	0
0_2^+ alvo	g.s.	g.s.	0_2^+	g.s.	0	2	0
2_2^+ projétil	2_2^+	g.s.	g.s.	g.s.	2	2	$-2 \leq M \leq 2$
2_2^+ alvo	g.s.	g.s.	2_2^+	g.s.	2	2	$-2 \leq M \leq 2$
4_2^+ projétil	4_2^+	g.s.	g.s.	g.s.	4	2	$-4 \leq M \leq 4$
4_2^+ alvo	g.s.	g.s.	4_2^+	g.s.	4	2	$-4 \leq M \leq 4$
3_1^- projétil	g.s.	3_1^-	g.s.	g.s.	3	1	$-3 \leq M \leq 3$
3_1^- alvo	g.s.	g.s.	g.s.	3_1^-	3	1	$-3 \leq M \leq 3$

Tabela 2.1: Canais de reação no contexto do GRVM, que serão assumidos posteriormente nos cálculos CC.

2.4 Condições de contorno e seções de choque

As condições de contorno adotadas aqui, para resolver as equações acopladas nos cálculos CC, estão de acordo com as referências [17] e [18]; e são dadas em relação às funções radiais do sistema, obtidas ao resolver as equações diferenciais acopladas de maneira numérica.

Para o canal elástico (entrada) e para os inelásticos, as condições de contorno são:

$$f_{J,0;g.s.0;g.s.0}(R \rightarrow \infty) = \frac{i}{2}[H_J^-(kR) - S_J H_J^+(kR)], \quad (2.4.1)$$

$$f_{L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2}^{(J)}(R \rightarrow \infty) = -\frac{i}{2} S_{L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2}^{(J)} H_L^+(kR), \quad (2.4.2)$$

sendo

$$H_L^\pm = G_L \pm i F_L, \quad (2.4.3)$$

onde $G_L(kR)$ e $F_L(kR)$ são as funções de onda de Coulomb com

$$k = \frac{\sqrt{2\mu(E_{c.m.} - E^*)}}{\hbar}, \quad (2.4.4)$$

que, para cada canal, tem uma energia de excitação particular E^* , a qual define o valor de k . Como convenção para o aqui escrito, daqui em diante designaremos como k o valor correspondente ao canal elástico, e k' (de maneira genérica) para os diferentes canais inelásticos.

S_J e $S_{L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2}^{(J)}$ são os elementos da matriz S , e dado que esses elementos são números complexos, podemos escrevê-los em termos do módulo e da defasagem δ como:

$$S = |S|e^{2i\delta}. \quad (2.4.5)$$

Nos canais inelásticos, a condição (2.4.2) é satisfeita para $E_{c.m.} - E^* > 0$. Para casos em que $E_{c.m.} - E^* < 0$ surgem estados virtuais que influem nos cálculos CC. Nesses casos a matriz S inelástica desaparece, e (2.4.2) não é mais válida; sendo que, então, a função de onda inelástica é assintoticamente proporcional à função de Whittaker [19].

Dado isso, construímos a amplitude de espalhamento elástico:

$$f(\theta) = f_C(\theta) + \frac{1}{2ik} \sum_J (2J+1) e^{2i\sigma_J} (S_J - 1) P_J(\cos \theta) \quad (2.4.6)$$

e as amplitudes de espalhamento de cada canal inelástico

$$f_{M_I}(\theta, \phi) = \frac{\sqrt{4\pi}}{ik'} \sum_{JL} \sqrt{(2J+1)} C_{-M_I M_I 0}^{L I J} e^{i(\sigma_J + \sigma_L)} S_{L,I;\eta_1 I_1;\eta_2 I_2}^{(J)} Y_{LM_I}(\theta, \phi) \quad (2.4.7)$$

sendo σ_J a defasagem de Coulomb no canal elástico e σ_L a defasagem de Coulomb correspondente a cada um dos canais inelásticos (cada defasagem depende de uma energia de excitação diferente). $f_C(\theta)$ é a denominada amplitude de espalhamento de Coulomb (ou Rutherford), dada por:

$$f_C(\theta) = -\frac{\eta}{2k \sin^2(\theta/2)} e^{-i\eta \ln[\sin^2(\theta/2)] + 2i\sigma_0} \quad (2.4.8)$$

com

$$\sigma_0 = \arg \Gamma(1 + i\eta) \quad (2.4.9)$$

e η o parâmetro de Sommerfeld definido por:

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{\hbar^2 k} \quad (2.4.10)$$

Com isso podemos calcular as seções de choque diferenciais elástica e inelástica (para cada canal) dadas por:

$$\frac{d\sigma_{el}}{d\Omega} = |f(\theta)|^2 \quad (2.4.11)$$

e

$$\frac{d\sigma_{inel}}{d\Omega} = \frac{k'}{k} \sum_{M_I} |f_{M_I}(\theta, \phi = 0)|^2 \quad (2.4.12)$$

($\frac{d\sigma_{inel}}{d\Omega}$ vai ser independente de ϕ e, portanto, podemos assumir um valor particular $\phi = 0$).

Na equação (2.4.7), para $\phi = 0$, podemos escrever

$$Y_{LM_I}(\theta, 0) = \sqrt{\frac{(2L+1)(L-M_I)!}{4\pi(L+M_I)!}} P_{LM_I}(\cos \theta) \quad (2.4.13)$$

com $P_{LM_I}(\cos \theta)$ sendo os polinômios associados de Legendre.

Para cada canal inelástico, a correspondente seção de choque integrada é dada por:

$$\sigma_{inel} = \frac{\pi k'}{k^3} \sum_J (2J+1) \sum_{L,I,\eta_1 I_1, \eta_2 I_2} |S_{L,I;\eta_1 I_1; \eta_2 I_2}^{(J)}|^2 \quad (2.4.14)$$

A seção de choque total de reação é dada por:

$$\sigma_R = \frac{\pi}{k^2} \sum_J (2J+1) (1 - |S_J|^2) \quad (2.4.15)$$

Com o potencial imaginário $iW(R)$ inserido nos potenciais diagonais, podemos calcular a correspondente seção de choque, que será associada ao processo de fusão:

$$\sigma_{fus} = -\frac{4\pi}{kE_{c.m.}} \sum_J (2J+1) \int_0^\infty W(R) |f(R)|^2 dR \quad (2.4.16)$$

sendo

$$|f(R)|^2 = |f_{J,0;\eta_1 0; \eta_2 0}|^2 + \sum_{L,I,\eta_1 I_1, \eta_2 I_2} |f_{L,I;\eta_1 I_1; \eta_2 I_2}^{(J)}|^2 \quad (2.4.17)$$

Também é possível calcular, no contexto do GRVM, σ_{fus} por outro método, equivalente matematicamente a (2.4.16), usando

$$\sigma_{fus} = \sigma_R - \sum_{inel} \sigma_{inel}. \quad (2.4.18)$$

A razão pela qual não vai ser usada a equação acima é basicamente numérica, já que quando σ_R e $\sum \sigma_{inel}$ têm valores muito próximos, a subtração correspondente pode levar a erros grandes.

Capítulo 3

Densidades de transição e GRVM

Sumário

3.1 Densidades de transição	27
3.2 Densidades de transição reduzidas no contexto do GRVM	30

Como comentado no capítulo anterior, ao calcular os potenciais de acoplamento dentro do contexto de dupla-convolução, os resultados finais vão estar em função das densidades de transição, conforme 2.2.8. Neste capítulo será apresentado o formalismo para calcular essas densidades de transição de maneira geral, e também para o caso particular do GRVM.

3.1 Densidades de transição

De maneira geral, uma densidade, deformada ou não, pode ser expandida em multipolos:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\lambda\mu} \rho_{\lambda\mu}(r) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_r), \quad (3.1.1)$$

com

$$\rho_{\lambda\mu}(r) = \int \rho(\vec{r}) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r, \quad (3.1.2)$$

onde $\rho_{\lambda\mu}(r)$ é a densidade de multipolo. Como a densidade é real, temos que

$$\rho_{\lambda-\mu}(r) = (-1)^\mu \rho_{\lambda\mu}^*(r). \quad (3.1.3)$$

Essa expansão é sempre possível devido à propriedade de completude dos harmônicos esféricos.

Podemos calcular, então, a *densidade de transição* entre um estado inicial $|\phi_{\eta'IM'}\rangle$ e um estado final $|\phi_{\eta IM}\rangle$, segundo a definição dada em [20] como:

$$\rho^{\eta'; I' M' \rightarrow \eta; IM}(\vec{r}) = \langle \phi_{\eta IM} | \rho(\vec{r}) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle. \quad (3.1.4)$$

onde η e η' representam todos os números quânticos relacionados com esses estados, sem incluir os spins I , I' e suas respectivas projeções M e M' . Agora escrevendo $\rho(\vec{r})$ segundo (3.1.1), obtemos:

$$\rho^{\eta'; I' M' \rightarrow \eta; IM}(\vec{r}) = \sum_{\lambda\mu} \langle \phi_{\eta IM} | \rho_{\lambda\mu}(r) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_r) \quad (3.1.5)$$

Para calcular os elementos da matriz de densidade de transição $\langle \phi_{\eta IM} | \rho_{\lambda\mu}(r) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle$, podemos usar o teorema de Wigner-Eckart [21], sendo possível dessa maneira fatorizar a dependência angular desses elementos de matriz, que é dada pelos coeficientes de Clebsch-Gordan. De maneira geral, se $T_{\lambda\mu}$ é um operador tensorial esférico, podemos escrever

$$\langle I_f M_f | T_{\lambda\mu} | I_i M_i \rangle = T_{\lambda\mu}^{I_i M_i \rightarrow I_f M_f} = C_{M_i \mu M_f}^{I_i \lambda I_f} \langle I_f || T_{\lambda} || I_i \rangle \quad (3.1.6)$$

onde $\langle I_f || T_{\lambda} || I_i \rangle$ são os elementos da matriz reduzida. Daqui obtemos que:

$$T_{\lambda}^{I_i \rightarrow I_f} \equiv \langle I_f || T_{\lambda} || I_i \rangle = \frac{\langle I_f M_f | T_{\lambda\mu} | I_i M_i \rangle}{C_{M_i \mu M_f}^{I_i \lambda I_f}} \quad (3.1.7)$$

Para facilidade no cálculo de $T_{\lambda}^{I_i \rightarrow I_f}$, e sem perda de generalidade, vamos fazer $M_i = 0$, $\mu = 0$ e $M_f = 0$ em (3.1.7); ficando então para cada I_i e I_f :

$$T_{\lambda}^{I_i \rightarrow I_f} = \frac{\langle I_f 0 | T_{\lambda 0} | I_i 0 \rangle}{C_{0 0 0}^{I_i \lambda I_f}} \quad (3.1.8)$$

onde definimos $T_{\lambda}^{I_i \rightarrow I_f} = 0$ se $C_{0 0 0}^{I_i \lambda I_f} = 0$. Levando em conta as propriedades dos coeficientes de Clebsch-Gordan, temos que: $|I_f - I_i| \leq \lambda \leq I_f + I_i$ e $\lambda + I_f + I_i = \text{par}$. Também vai se cumprir a relação,

$$T_{\lambda}^{I_i \rightarrow I_f} = (-1)^{\lambda} \sqrt{\frac{(2I_i + 1)}{(2I_f + 1)}} T_{\lambda}^{I_f \rightarrow I_i} \quad (3.1.9)$$

Agora, dado que a densidade de multipolo $\rho_{\lambda\mu}(r)$ se comporta como um operador tensorial esférico, vamos definir:

$$\rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r) \equiv \langle I || \rho_{\lambda}(r) || I' \rangle = \frac{\langle \phi_{\eta I 0} | \rho_{\lambda 0}(r) | \phi_{\eta' I' 0} \rangle}{C_{0 0 0}^{I \lambda I'}}. \quad (3.1.10)$$

Vamos nos referir a essa quantidade como *densidade de transição reduzida* [20]. Daqui,

$$\langle \phi_{\eta I M} | \rho_{\lambda\mu}(r) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle = C_{M' \mu M}^{I' \lambda I} \rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r). \quad (3.1.11)$$

Ou seja, conhecida a densidade de transição reduzida, a densidade de transição é obtida pela simples multiplicação por um coeficiente de Clebsch-Gordan. Dessa forma, vamos focar apenas na densidade de transição reduzida. Com isso podemos relacionar então (2.2.7), que é associada ao potencial de acoplamento, com (3.1.11) para obter:

$$\langle \phi | M_{\lambda\mu} | \phi' \rangle = C_{M' \mu M}^{I' \lambda I} \int \rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r) j_{\lambda}(kr) r^2 dr. \quad (3.1.12)$$

Vamos adotar a seguinte notação para a transformada de Fourier da densidade de transição:

$$\hat{\rho}_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(k) \equiv \sqrt{4\pi} \int \rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r) j_{\lambda}(kr) r^2 dr. \quad (3.1.13)$$

Considerando (2.2.5), (3.1.12) e (3.1.13), a equação (2.2.3) para o potencial de acoplamento pode ser reescrita como função das transformadas de Fourier das densidades:

$$\begin{aligned} U_{L', I'; \eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2}^{(L, I; \eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(R) &= (-1)^L i^{L+L'} \sum_{\lambda} i^{\lambda} C_{0 0 0}^{L' \lambda L} \sum_{\lambda_1 \lambda_2} i^{\lambda_1 - \lambda_2} C_{0 0 0}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \times \\ &\quad \sqrt{(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)} V_{\lambda, \lambda_1, \lambda_2}^{(\eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2 \rightarrow \eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(R) \times \\ &\quad \sum_{M_I M_L} \sum_{M'_I M'_L} C_{M_I M_L 0}^I C_{M'_I M'_L 0}^{I'} \sum_{\mu} C_{M_L \mu M'_L}^L \sum_{\mu_1 \mu_2} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \times \\ &\quad \sum_{M_1 M_2} \sum_{M'_1 M'_2} C_{M_1 M_2 M_I}^{I_1 I_2 I} C_{M'_1 M'_2 M'_I}^{I'_1 I'_2 I'} C_{M'_1 \mu_1 M_1}^{I'_1 \lambda_1 I_1} C_{M'_2 \mu_2 M_2}^{I'_2 \lambda_2 I_2}, \end{aligned} \quad (3.1.14)$$

com

$$V_{\lambda, \lambda_1, \lambda_2}^{(\eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2 \rightarrow \eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(R) = \frac{1}{2\pi^2} \int \tilde{v}(k) \hat{\rho}_{\lambda_1}^{\eta'_1; I'_1 \rightarrow \eta_1; I_1}(k) \hat{\rho}_{\lambda_2}^{\eta'_2; I'_2 \rightarrow \eta_2; I_2}(k) j_{\lambda}(kR) k^2 dk \quad (3.1.15)$$

Levando em consideração (3.1.9) e as propriedades dos coeficientes de Clebsch-Gordan, é possível mostrar que:

$$U_{L, I; \eta_1 I_1; \eta_2 I_2}^{(L', I'; \eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2)}(R) = (-1)^{L+L'} U_{L', I'; \eta'_1 I'_1; \eta'_2 I'_2}^{(L, I; \eta_1 I_1; \eta_2 I_2)}(R). \quad (3.1.16)$$

É de notar que as propriedades dos coeficientes de Clebsch-Gordan vão impor algumas relações e limites entre os índices das somatórias, para evitar que esses coeficientes se anulem em (3.1.14). Por exemplo: $M_I = M_1 + M_2$, $M'_I = M'_1 + M'_2$, $M_L = -(M_1 + M_2)$, $M'_L = -(M'_1 + M'_2)$, $\mu_1 = M_1 - M'_1$, $\mu_2 = M_2 - M'_2$, $\mu = (M_1 + M_2) - (M'_1 + M'_2)$, $\lambda + \lambda_1 + \lambda_2 = \text{par}$, $\lambda + L + L' = \text{par}$, $\lambda_1 + I_1 + I'_1 = \text{par}$ e $\lambda_2 + I_2 + I'_2 = \text{par}$, etc. Algumas relações adicionais são dadas pelas considerações próprias do modelo usado, no caso o GRVM. Assim sendo, o número de somas que devem ser realizadas para o cálculo de (3.1.14) são bastante reduzidas.

Como caso particular de interesse, quando somente um dos núcleos é deformado, podemos reescrever (2.2.2) e (3.1.14) como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} \right) - (E_{c.m.} - E^*) \right] f_{L,\eta I}(R) + \sum_{L'} \sum_{\eta' I'} U_{L',\eta' I'}^{L,\eta I}(R) f_{L',\eta' I'}(R) = 0, \quad (3.1.17)$$

e

$$U_{L',\eta' I'}^{L,\eta I}(R) = (-1)^L i^{L+L'} \sum_{\lambda} (-1)^{\lambda} C_{0 \ 0 \ 0}^{L' \ \lambda \ L} \sqrt{2\lambda+1} V_{\lambda}^{(\eta' I' \rightarrow \eta I)}(R) \times \sum_{M_I M_L} \sum_{M'_I M'_L} C_{M_I M_L 0}^{I \ L \ J} C_{M'_I M'_L 0}^{I' \ L' \ J} \sum_{\mu} C_{M_L \ \mu \ M'_L}^{L \ \lambda \ L'} C_{M'_I \ \mu \ M_I}^{I' \ \lambda \ I}. \quad (3.1.18)$$

3.2 Densidades de transição reduzidas no contexto do GRVM

Uma aproximação feita no GRVM tem relação com a expansão da densidade em multipolos até o modo de octupolo e até termos de segunda ordem na deformação. De fato, substituindo $\rho(\vec{r})$ dado em (1.2.12) na equação (3.1.2), podemos calcular as densidades de multipolo:

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda\mu}(r) &= \int \left(\rho_{nd}(r) + \sum_{\lambda' \mu'} \alpha_{\lambda' \mu'}^* Y_{\lambda' \mu'}(\Omega_r) \partial \rho(r) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* Y_{\lambda' \mu'}(\Omega_r) Y_{\lambda'' \mu''}(\Omega_r) \partial^2 \rho(r) \right) \times Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r \\ &= \rho_{nd}(r) \int Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r + \partial \rho(r) \sum_{\lambda' \mu'} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \int Y_{\lambda' \mu'}(\Omega_r) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r \\ &\quad + \frac{1}{2} \partial^2 \rho(r) \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \int Y_{\lambda' \mu'}(\Omega_r) Y_{\lambda'' \mu''}(\Omega_r) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r. \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

As integrais dos harmônicos esféricos são escritas em função dos Clebsch-Gordan, obtendo finalmente:

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda\mu}(r) = & \sqrt{4\pi} \rho_{nd}(r) \delta_{\lambda 0} + \alpha_{\lambda\mu} \partial \rho(r) \\ & + \frac{1}{2} \partial^2 \rho(r) (-1)^\mu \sum_{\lambda'\mu'} \sum_{\lambda''\mu''} \sqrt{\frac{(2\lambda'+1)(2\lambda''+1)}{4\pi(2\lambda+1)}} C_{\mu'\mu''-\mu}^{\lambda'\lambda''\lambda} C_{0\ 0\ 0}^{\lambda'\lambda''\lambda} \alpha_{\lambda'\mu'}^* \alpha_{\lambda''\mu''}^*, \end{aligned} \quad (3.2.2)$$

onde $\delta_{\lambda\mu}$ é a função delta de Kronecker.

Dado que a densidade de transição é definida por (3.1.11) e (3.1.10), devemos focar nossa atenção no cálculo de $\rho_{\lambda 0}(r)$ através de (3.2.2), obtendo como resultado:

$$\begin{aligned} \rho_{\lambda 0}(r) = & \sqrt{4\pi} \rho_{nd}(r) \delta_{\lambda 0} + \partial \rho(r) \alpha_{\lambda 0} + \frac{1}{2} \partial^2 \rho(r) \times \\ & \sum_{\lambda'=2}^3 \sum_{\lambda''=2}^3 \sqrt{\frac{(2\lambda'+1)(2\lambda''+1)}{4\pi(2\lambda+1)}} \sum_{\mu} (-1)^\mu \alpha_{\lambda'\mu}^* \alpha_{\lambda''\mu}^* C_{\mu-\mu\ 0}^{\lambda'\lambda''\lambda} C_{0\ 0\ 0}^{\lambda'\lambda''\lambda}. \end{aligned} \quad (3.2.3)$$

Considerando (3.1.10), (3.1.11) e (3.2.3), fica claro que a densidade de transição $\langle \phi | \rho_{\lambda\mu}(r) | \phi' \rangle$, pode ser obtida através de uma expressão analítica, que envolve Clebsch-Gordan e funções simples de r (vide equações (1.2.14)), como função de $\langle \phi | \alpha_{\lambda 0} | \phi' \rangle$ e $\langle \phi | \alpha_{\lambda'\mu}^* \alpha_{\lambda''\mu}^* | \phi' \rangle$, onde:

$$\langle \phi | \alpha_{\lambda 0} | \phi' \rangle = \int \phi_{n_2 I_2 n_3 I_3; I_0}^*(\xi) \alpha_{\lambda 0}(\xi) \phi_{n'_2 I'_2 n'_3 I'_3; I'_0}(\xi) d\xi, \quad (3.2.4)$$

e

$$\langle \phi | \alpha_{\lambda'\mu}^* \alpha_{\lambda''\mu}^* | \phi' \rangle = \int \phi_{n_2 I_2 n_3 I_3; I_0}^*(\xi) \alpha_{\lambda'\mu}^* \alpha_{\lambda''\mu}^* \phi_{n'_2 I'_2 n'_3 I'_3; I'_0}(\xi) d\xi. \quad (3.2.5)$$

Os termos $\alpha_{\lambda\mu}$ de (3.2.4) e (3.2.5) estão relacionados às coordenadas intrínsecas do núcleo através de (1.1.3)-(1.1.6). Dessa maneira, a integração das matrizes de rotação sobre os ângulos de Euler não envolve cálculos numéricos e, sim, expressões analíticas relacionadas com os coeficientes de Clebsch-Gordan [22, 23]. A integração sobre β_3 também pode ser feita analiticamente, já que as auto-funções de octupolo são as do modelo vibracional puro, explicitamente dadas em (1.1.23). De fato, somente integrais bidimensionais, relacionadas com as coordenadas intrínsecas de quadrupolo, β_2 e γ , devem ser calculadas numericamente em (3.2.4) e (3.2.5). Portanto, neste contexto, os cálculos de potenciais CC somente precisam da computação numérica de um pequeno número de integrais bidimensionais. Esse é um

dos objetivos atingidos no presente trabalho, permitindo obter dessa maneira potenciais de acoplamento com uma boa precisão no contexto dos potenciais de dupla-convolução.

Cálculos explícitos de $\langle \phi | \alpha_{\lambda 0} | \phi' \rangle$, $\langle \phi | \alpha_{\lambda' \mu}^* \alpha_{\lambda'' \mu}^* | \phi' \rangle$ e das densidades de transição reduzidas são apresentadas no apêndice A.2, assim como detalhes dos cálculos analíticos em A.1. No apêndice A.3, como um caso particular do GRVM quando $\tilde{\beta}_{20} = 0$, as integrais envolvidas são resolvidas analiticamente dentro do modelo vibracional puro, usando as correspondentes auto-funções do modo de quadrupolo.

Capítulo 4

Espalhamento elástico e inelástico elétron-núcleo

Sumário

4.1 Fator de forma	34
4.2 Probabilidade de transição elétrica reduzida $B(E\lambda)$	38

Desde meados do século passado, o espalhamento elétron-núcleo tem sido uma ferramenta muito útil nas pesquisas sobre estrutura nuclear [24, 25, 20, 26, 27, 10, 28]. Este método tornou-se um bom teste de modelos teóricos do núcleo, já que, devido à falta de estrutura do elétron e que a interação dominante -eletromagnética- entre o elétron e o núcleo é bem conhecida, o fenômeno é fácil de analisar e de relacionar com os modelos de estrutura nuclear.

As primeiras pesquisas experimentais de estrutura nuclear com elétrons, desenvolvidas por Hofstadter [29, 24], estavam principalmente focadas em descrever distribuições de carga do *g.s.*, através do espalhamento elástico, passando posteriormente ao estudo de transições desde o *g.s.* a estados excitados, através do espalhamento inelástico [24]. No contexto de modelos macroscópicos de estrutura nuclear, os dados experimentais podem ser descritos através de parâmetros nas densidades nucleares que podem ser ajustados (e.g. [11, 12]).

Atualmente, existem vários projetos para realizar experimentalmente o espalhamento elétron-núcleo com núcleos de meia-vida curta: o projeto SCRIT (do inglês *Self Confining Radioactive Isotope Target*) [30, 31, 32] está sendo construído no laboratório RIKEN no Japão

e o projeto ELISe (do inglês *ELectron-Ion Scattering in a storage ring*) [33, 34, 35] está planejado para ser construído no laboratório GSI na Alemanha. Esses equipamentos darão a oportunidade de estudar a distribuição de densidade de carga e densidades de transição para núcleos instáveis. Daqui o renovado interesse pelo estudo teórico do espalhamento elétron-núcleo [36, 37, 38, 39, 40, 28, 41], com modelos que possam descrever núcleos fora da linha de estabilidade e que sirvam como referência em experimentos futuros.

4.1 Fator de forma

Dado que o núcleo tem tamanho finito, a seção de choque de espalhamento do elétron pelo núcleo é diferente da seção de choque para uma carga puntual. Essa diferença pode ser levada em conta pelo chamado *fator de forma* $F(q)$, ou fator de estrutura. Esse termo é introduzido em problemas de espalhamento de elétrons para dar conta do tamanho e forma do núcleo alvo.

A seção de choque diferencial para uma energia de bombardeio E e no ângulo de espalhamento θ , entre um elétron e um núcleo com spin zero, pode ser expressa como o produto da seção de choque de Mott e o fator de forma ao quadrado:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Exp}} = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} |F(q)|^2, \quad (4.1.1)$$

sendo q o momento transferido definido por [42]:

$$q \approx \frac{2E \sin(\theta/2)}{\hbar c} \sqrt{\frac{1 - E^*/E}{1 + 2E \sin^2(\theta/2)/Mc^2}}, \quad (4.1.2)$$

onde E^* é a energia de excitação do correspondente estado excitado, M a massa do núcleo e $\hbar c = 197.3$ MeV fm. Neste trabalho vamos calcular a seção de choque de Mott segundo o método apresentado no apêndice C, o qual dá resultados mais precisos em comparação com as aproximações assumidas em muitos trabalhos, especialmente em cálculos que envolvem núcleos pesados e energias de bombardeio baixas.

Vamos calcular os fatores de forma dentro do contexto da Aproximação de Onda Plana de Born (PWBA, do inglês *Plane-Wave Born Approximation*), também chamada de “primeira aproximação de Born” [20]. Nesta abordagem, como veremos, o fator de forma envolve

termos do tipo $\int \rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r) j_{\lambda}(kr) r^2 dr$, que também estão presentes no cálculo de potenciais de acoplamento dentro do contexto de dupla-convolução. Nessa aproximação, as ondas incidentes e difratadas no processo de espalhamento são consideradas planas e, portanto, o PWBA não dá conta da distorção causada pelo campo Coulombiano do núcleo alvo. Uma primeira correção para esse fato é obtida graficando os valores experimentais de $|F(q)|^2$, obtidos com (4.1.1), como função de um momento transferido efetivo q_{eff} , relacionado a q por [20, 26, 27, 43, 44, 45]:

$$q_{\text{eff}} = q \left(1 + \frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{5}} \frac{Ze^2}{E r_{\text{rms}}} \right), \quad (4.1.3)$$

onde r_{rms} é o raio quadrático médio (rms, do inglês *root-mean-square*) da distribuição de carga nuclear, dado por:

$$r_{\text{rms}} = \sqrt{\langle r^2 \rangle} = \sqrt{\frac{\int \rho_{g.s.}(r) r^4 dr}{\int \rho_{g.s.}(r) r^2 dr}} = \sqrt{\frac{4\pi}{Z} \int \rho_{g.s.}(r) r^4 dr}, \quad (4.1.4)$$

sendo $\rho_{g.s.}(r)$ o valor médio da densidade no $g.s.$ No contexto do GRVM, temos:

$$\begin{aligned} \rho_{g.s.}(r) &= \langle \phi_{g.s.} | \rho(\vec{r}) | \phi_{g.s.} \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}(r) \\ &= \rho_{nd}(r) + \frac{\langle \beta_2^2 \rangle + \langle \beta_3^2 \rangle}{8\pi} \left[\partial^2 \rho(r) - \left(\frac{\int \partial^2 \rho(r) r^2 dr}{\int \partial \rho(r) r^2 dr} \right) \partial \rho(r) \right], \end{aligned} \quad (4.1.5)$$

$$\langle \beta_{\lambda}^2 \rangle \equiv \langle \phi_{g.s.} | \beta_{\lambda}^2 | \phi_{g.s.} \rangle = b_{\lambda}^2 \int |\chi_{g.s.}^{(\lambda)}|^2 \tilde{\beta}_{\lambda}^2 d\tau_{\lambda}. \quad (4.1.6)$$

Para o modo de octupolo, obtemos: $\langle \beta_3^2 \rangle = 3 b_3^2$. No caso particular do VM ($\tilde{\beta}_{20} = 0$), obtemos para o modo de quadrupolo: $\langle \beta_2^2 \rangle = 5 b_2^2$.

Dentro do PWBA, o fator de forma total $F(q)$ consiste de uma parte longitudinal F_L , relacionando à parte elétrica, e uma parte transversa F_T , que se relaciona à parte magnética. Com isso, $F(q)$ é definido como [20, 46, 47]

$$|F(q)|^2 = |F_L(q)|^2 + (1/2 + \tan^2 \theta/2) |F_T(q)|^2. \quad (4.1.7)$$

No espalhamento elástico só a parte “elétrica” - F_L - da interação contribui, enquanto no espalhamento inelástico aparecem momentos magnéticos diferentes de zero, que podem interagir com o momento dipolar magnético intrínseco do elétron [48]. Desprezando F_T segundo os argumentos dados em [49], o fator de forma para a excitação do $g.s.$ (para núcleos com $g.s.$ de

spin 0^+) para um estado excitado com spin I , está relacionado com a densidade de transição por [20]:

$$|F(q)|_{g.s. \rightarrow I_n}^2 = \frac{4\pi (2I+1)}{Z^2} \left| \int \rho_I^{g.s. \rightarrow I_n}(r) j_I(qr) r^2 dr \right|^2. \quad (4.1.8)$$

Daqui, para o espalhamento elástico temos:

$$\begin{aligned} |F(q)|_{elas}^2 &= \frac{4\pi}{Z^2} \left| \int \rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}(r) j_0(qr) r^2 dr \right|^2 \\ &= \left| \frac{4\pi}{Z} \int \rho_{g.s.}(r) j_0(qr) r^2 dr \right|^2 \end{aligned} \quad (4.1.9)$$

com $\rho_{g.s.}(r)$ definida na equação (4.1.5). No apêndice B, apresentamos o fator de forma relacionando à transição entre dois estados quaisquer.

A notação aqui usada, $\rho_{\lambda}^{I' \rightarrow I_n}(r)$, vai indicar a transição entre o estado $I'_{n'}$ inicial e o estado I_n final, e leva em conta os estados considerados no GRVM segundo a tabela 2.1. Somente escrevemos o spin I e nível n do estado, já que não há lugar para ambiguidades e facilita a escrita. No caso do estado fundamental, $n_2 I_2 n_3 I_3$; $I = 0000$; 0000 ; 0 , vamos escrevê-lo simplesmente como $g.s.$

Para transições desde o $g.s$ aos estados 2_1^+ (quadrupolo) e 3_1^- (octupolo), as densidades de transição do GRVM são dadas por:

$$\begin{aligned} \rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1}(r) &= \frac{b_2}{\sqrt{5}} \partial \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} (\cos \gamma \chi_{120}^{(2)} + \sqrt{2} \sin \gamma \chi_{122}^{(2)}) d\tau_2 \right] \\ &+ \frac{b_2^2}{14\sqrt{\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} (\cos 2\gamma \chi_{120}^{(2)} - \sqrt{2} \sin 2\gamma \chi_{122}^{(2)}) d\tau_2 \right], \end{aligned} \quad (4.1.10)$$

$$\rho_3^{g.s. \rightarrow 3_1}(r) = b_3 \sqrt{\frac{3}{7}} \partial \rho(r) \quad (4.1.11)$$

Dentro do VM, $\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1}(r) = b_2 \partial \rho(r)$.

A aproximação PWBA é geralmente considerada precisa somente para núcleos com $\frac{Z}{137} \ll 1$, dado que a expressão (C.0.13) é comumente assumida em cálculos de seção de choque de Mott [50]. Neste trabalho temos assumido a expressão (C.0.11), muito mais precisa para esses cálculos. Com o intuito de ilustrar a precisão do PWBA sob essas condições, vamos comparar os correspondentes resultados do fator de forma assim calculados com os obtidos

através da Aproximação de Onda Distorcida de Born (DWBA, do inglês *Distorted-Wave Born Approximation*)[50]. No DWBA, o canal elástico é tratado através da equação de Dirac, em que a distribuição de carga do núcleo é levada em conta no campo Coulombiano, mas os acoplamentos são desprezados. Os canais inelásticos são, então, relacionados (como uma perturbação) diretamente (e somente) ao canal elástico (vide apêndice D). Algumas diferenças entre as duas aproximações podem ser consultadas nas referências [44, 50].

Os resultados para os fatores de forma do DWBA, apresentados neste trabalho, foram extraídos de resultados experimentais e teóricos de [42, 45, 51]. Nos cálculos PWBA, assumimos as mesmas densidades reportadas nesses artigos, para que, dessa maneira, tenha sentido a comparação entre ambas aproximações. As linhas pretas e vermelhas na figura (4.1.1) representam os resultados para os fatores de forma obtidos com as aproximações PWBA e DWBA, respectivamente, para o espalhamento elástico de elétrons sobre ^{28}Si , ^{152}Sm e ^{192}Os . No caso do ^{152}Sm , são também mostrados os resultados para a excitação inelástica 2_1^+ . Para todos os núcleos, os nossos resultados com o PWBA podem ser considerados como uma boa aproximação dos resultados DWBA, exceto nas regiões de mínimos da seção de choque. O mesmo resultado é obtido e discutido em [44]. Somente para propósito de comparação, no caso do ^{152}Sm são também mostrados, na figura (4.1.1), os pontos experimentais calculados com PWBA, usando a menos precisa equação (C.0.13) no cálculo da seção de choque de Mott. Além de uma pior precisão, nesse caso os resultados do fator de forma para valores similares de q apresentam discrepância dependendo da energia de bombardeio.

Dentro dos limites discutidos acima, os resultados do PWBA e DWBA são similares. Porém, é necessário verificar a aplicabilidade da própria DWBA. Comparações entre resultados de cálculos CC e DWBA, para espalhamento elétron-núcleo dos núcleos ^{152}Sm e ^{166}Er , foram realizadas em [52]. As diferenças entre esses resultados teóricos foram pequenas para espalhamentos que envolviam contribuições dos modos de multipolo $\lambda = 0$ e 2 , e consideravelmente maiores para casos com $\lambda = 4$ e 6 ; onde excitações sequenciais podem ocorrer. Daqui, para evitar contribuições significativas de excitações sequenciais, nos capítulos a seguir assumiremos o PWBA nas nossas análises de espalhamento elétron-núcleo, e só levaremos em consideração o canal elástico e as excitações do *g.s.* aos estados 2_1^+ e 3_1^- .

Figura 4.1.1: As linhas pretas e vermelhas na figura representam os resultados para o fator de forma obtidos com as aproximações PWBA e DWBA, respectivamente, para o espalhamento elástico de elétrons sobre ^{28}Si , ^{152}Sm e ^{192}Os , e também na excitação inelástica 2_1^+ ^{152}Sm . No caso do ^{152}Sm , os símbolos correspondem a resultados obtidos com PWBA para diferentes energias de bombardeio, assumindo (C.0.11) para o cálculo da seção de choque de Mott. Os resultados dos fatores de forma obtidos através da aproximação DWBA, apresentados aqui, foram extraídos de seções de choque experimentais e teóricas reportadas em [42, 45, 51].

4.2 Probabilidade de transição elétrica reduzida $B(E\lambda)$

Os valores experimentais de $B(EI)$ presentes na literatura, podem ser comparados com os obtidos no GRVM para testar a acurácia do modelo. A probabilidade de transição elétrica reduzida, $B(EI, g.s. \rightarrow I_n)$, desde o $g.s.$ a estados excitados de spin I , é definida por [49, 45, 53]:

$$B(EI, g.s. \rightarrow I_n) = e^2 (2I + 1) \left(\int r^{I+2} \rho_I^{g.s. \rightarrow I_n}(r) dr \right)^2. \quad (4.2.1)$$

Podemos relacionar o fator de forma inelástico (4.1.8) com o $B(EI)$ de (4.2.1). Isso é

feito através da expansão em série da função esférica de Bessel:

$$j_I(qr) = (2qr)^I \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (k+I)!}{(k)!(2k+2I+1)!} (qr)^{2k}. \quad (4.2.2)$$

Para q pequenos, podemos tomar explicitamente os primeiros termos da série, obtendo:

$$\lim_{qr \rightarrow 0} j_I(qr) \simeq \frac{(qr)^I}{(2I+1)!!} \left[1 - \frac{(qr)^2}{2(2I+3)} + \frac{(qr)^4}{8(2I+3)(2I+5)} - \dots \right], \quad (4.2.3)$$

onde

$$(2I+1)!! = (2I+1)(2I-1)\dots \quad (4.2.4)$$

Daqui vamos ter que $|F(q \approx 0)|_{g.s. \rightarrow I_n}^2$ vem dado por:

$$|F(q \approx 0)|_{g.s. \rightarrow I_n}^2 \simeq \frac{4\pi q^{2I}}{Z^2 e^2} B(EI, g.s. \rightarrow I_n) \times \left\{ \frac{1}{(2I+1)!!} \left[1 - \frac{q^2 R_{tr}^2}{2(2I+3)} + \frac{q^4 R_{tr}^4}{8(2I+3)(2I+5)} \right] \right\} \quad (4.2.5)$$

Os raios efetivos de transição R_{tr}^m ($m = 2, 4$) são definidos por [20, 28]:

$$R_{tr}^m = \frac{\int \rho_I^{g.s. \rightarrow I_n} r^{I+2+m} dr}{\int \rho_I^{g.s. \rightarrow I_n} r^{I+2} dr} \quad (4.2.6)$$

Para o espalhamento elástico, (4.2.5) e (4.2.6) são reduzidas a:

$$|F(q \approx 0)|^2 \approx \left(1 - \frac{q^2 r_{rms}^2}{6} + \frac{q^4 R_{tr}^4}{120} \right)^2, \quad (4.2.7)$$

com

$$R_{tr}^4 = \frac{4\pi}{Z} \int \rho_{g.s.}(r) r^6 dr. \quad (4.2.8)$$

Dentro do contexto do GRVM, nos casos particulares dos estados 2_1^+ e 3_1^- obtemos:

$$B(E2, g.s. \rightarrow 2_1^+) = e^2 \left\{ \left[b_2 \int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{120}^{(2)} \cos \gamma + \chi_{122}^{(2)} \sqrt{2} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \times \right. \\ \left[\int \partial \rho(r) r^4 dr \right] + \frac{1}{14} \sqrt{\frac{5}{\pi}} \left[\int \partial \rho^2(r) r^4 dr \right] \times \\ \left. \left[b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{120}^{(2)} \cos 2\gamma - \chi_{122}^{(2)} \sqrt{2} \sin 2\gamma \right) d\tau_2 \right] \right\}^2, \quad (4.2.9)$$

$$B(E3, g.s. \rightarrow 3_1) = 3 e^2 b_3^2 \left[\int \partial \rho(r) r^5 dr \right]^2. \quad (4.2.10)$$

No caso particular do VM, para o modo quadrupolar, obtemos:

$$B(E2, g.s. \rightarrow 2_1^+) = 5 e^2 b_2^2 \left[\int \partial \rho(r) r^4 dr \right]^2. \quad (4.2.11)$$

Com o intuito de serem usadas mais para frente, na comparação com expressões de modelos comumente utilizados, as equações (4.2.10) e (4.2.11) podem ser reescritas como:

$$B(E3, g.s. \rightarrow 3_1) = \left[\frac{5 Z e R_0 \sigma_3}{4\pi} \left(\frac{\int \rho_{nd}(r) r^4 dr}{\int \rho_{nd}(r) r^2 dr} \right) \right]^2, \quad (4.2.12)$$

e

$$B(E2, g.s. \rightarrow 2_1^+) = \left[\frac{Z e R_0 \sigma_2}{\pi} \left(\frac{\int \rho_{nd}(r) r^3 dr}{\int \rho_{nd}(r) r^2 dr} \right) \right]^2, \quad (4.2.13)$$

onde $\sigma_2 = \sqrt{5} b_2$ e $\sigma_3 = \sqrt{3} b_3$. Aqui foi usado o fato de que

$$\left. \frac{\partial \rho(r, \Delta)}{\partial \Delta} \right|_{\Delta=0} = \partial \rho(r) = -R_0 \frac{d\rho_{nd}(r)}{dr}, \quad (4.2.14)$$

e foi realizada a integração por partes.

Dentro do modelo de corte abrupto (*sharp surface*), onde é assumida difusividade nula na densidade nuclear, e considerando a expansão da densidade somente até primeira ordem na deformação, uma expressão analítica é obtida para os modelos vibracional e rotacional puros [54]:

$$B(E\lambda, g.s. \rightarrow \lambda_1) = \left(\frac{3}{4\pi} Z e R_0^\lambda \sigma_\lambda \right)^2, \quad (4.2.15)$$

onde $\sigma_\lambda = \beta_\lambda$ (modelo rotacional) ou $\sigma_\lambda = \sqrt{2\lambda + 1} b_\lambda$ (modelo vibracional).

O GRVM não trata o modo vibracional de octupolo de forma completa (com todos os possíveis graus de liberdade, 7), só usando 3: $\tilde{\beta}_3$, $\theta_1^{(3)}$ e $\theta_2^{(3)}$. O numero de graus de liberdade é dado, de maneira geral, por $2\lambda + 1$, onde λ é a ordem da deformação. Então, ao invés de $\sigma_3 = \sqrt{7} b_3$ no modo vibracional octupolar completo, no GRVM temos $\sigma_3 = \sqrt{3} b_3$.

Capítulo 5

Resultados experimentais e teóricos de espalhamento elétron-núcleo

Como mencionado anteriormente, no contexto do GRVM são considerados explicitamente os estados: $g.s.$, 2_1^+ , 0_2^+ , 2_2^+ , 4_2^+ e 3_1^- , de núcleos par-par. Neste trabalho escolhemos um número relativamente grande de núcleos para serem estudados, analisando detalhadamente os correspondentes dados experimentais de espalhamento elétron-núcleo. Esse conjunto de núcleos, apresentado na primeira coluna da tabela 5.1, foi escolhido por constituir uma vasta região de massas nucleares, e por contar com relevantes dados experimentais de espalhamento elétron-núcleo e/ou densidades de transição, tanto do processo elástico como do inelástico.

A densidade experimental é obtida em muitos trabalhos de espalhamento elétron-núcleo através de parametrizações independentes de modelo [55, 56]. Essas densidades podem ser obtidas através de métodos tais como a expansão de Fourier-Bessel ou soma de Gaussianas, com parâmetros calibrados para ajustar os dados experimentais. Devido ao grande número de parâmetros ajustáveis, essas densidades experimentais dão uma descrição muito boa dos dados de fator de forma (dentro do DWBA).

Pelo anteriormente argumentado, assumimos que as densidades experimentais usadas neste trabalho descrevem satisfatoriamente os dados experimentais. Portanto, os parâmetros relacionados com as densidades GRVM são ajustados para reproduzir essas densidades experimentais (o melhor possível). Calculamos os fatores de forma dentro do contexto do PWBA, a partir das densidades experimentais, com o propósito de comparar os resultados com os

núcleo	2_1^+ E	0_2^+ E	0_2^+ T	2_2^+ E	2_2^+ T	4_2^+ E	4_2^+ T	3_1^- E	$\hbar\omega_2$	$\bar{\Delta}(\%)$
^{12}C	4.44	7.66	8.88	11.2	8.88	14.1	8.88	9.64	4.44	24
^{16}O	6.92	6.05	13.8	9.84	13.8	10.4	13.8	6.13	6.92	67
^{24}Mg	1.37	6.43	4.05	4.24	4.24	4.12	3.10	7.62	3.61	20
^{28}Si	1.78	4.98	6.17	7.38	6.59	4.62	4.24	6.88	5.90	14
^{32}S	2.23	3.78	4.46	4.28	4.46	4.46	4.46	5.01	2.23	7
^{40}Ca	3.90	3.35	7.81	5.25	7.81	5.28	7.81	3.74	3.90	77
^{48}Ca	3.83	4.28	7.66	6.34	7.66	4.50	7.66	4.51	3.83	57
^{52}Cr	1.43	2.65	2.86	2.96	2.86	2.37	2.86	4.56	1.43	11
^{58}Ni	1.45	2.94	2.91	2.78	2.91	2.46	2.91	4.47	1.45	8
^{64}Zn	0.99	1.91	1.98	1.80	1.98	2.31	1.98	3.00	0.99	9
^{70}Ge	1.04	1.22	2.08	1.71	2.08	2.15	2.08	2.56	1.04	32
^{76}Ge	0.56	1.91	1.19	1.11	1.16	1.41	1.14	2.69	0.69	21
^{88}Sr	1.84	3.16	3.67	3.22	3.67	4.23	3.67	2.73	1.84	14
^{90}Zr	2.19	1.76	4.37	3.31	4.37	3.08	4.37	2.75	2.19	74
^{92}Zr	0.93	1.38	1.87	1.85	1.87	1.50	1.87	2.34	0.93	20
^{92}Mo	1.51	2.52	3.02	3.09	3.02	2.28	3.02	2.85	1.51	18
^{108}Pd	0.43	1.05	0.97	0.93	0.95	1.05	0.90	2.05	0.64	8
^{110}Pd	0.37	0.95	0.83	0.81	0.81	0.92	0.77	2.04	0.54	9
^{110}Cd	0.66	1.47	1.50	1.48	1.47	1.54	1.37	2.08	1.02	4
^{120}Sn	1.17	1.88	2.34	2.10	2.34	2.19	2.34	2.40	1.17	14
^{142}Nd	1.58	2.22	3.15	2.38	3.15	2.10	3.15	2.08	1.58	41
^{150}Nd	0.13	0.68	0.68	0.85	0.72	0.38	0.35	0.93	0.69	8
^{152}Sm	0.12	0.68	0.68	0.81	0.72	0.37	0.33	1.04	0.70	7
^{154}Gd	0.12	0.68	0.68	0.82	0.72	0.37	0.33	1.25	0.70	7
^{166}Er	0.08	1.46	0.80	0.79	0.79	0.27	0.24	1.51	0.81	19
^{192}Os	0.21	0.96	0.49	0.49	0.49	0.58	0.43	1.34	0.36	25
^{194}Pt	0.33	1.27	0.68	0.62	0.67	0.81	0.66	1.43	0.39	24
^{196}Pt	0.36	1.14	0.75	0.69	0.73	0.88	0.72	1.45	0.44	19
^{208}Pb	4.09	4.87	8.17	4.93	8.17	4.32	8.17	2.61	4.09	74

Tabela 5.1: Energias de excitação (em MeV) experimental (E) e teórica (T) dos estados dos núcleos considerados neste trabalho. Também são apresentados os valores de $\hbar\omega_2$ (em MeV) obtidos do ajuste de dados e a diferença média entre os valores experimentais e teóricos, definidos pela equação (5.0.1).

correspondentes GRVM.

Nas nossas análises temos usado dados experimentais de densidade do $g.s.$ de [10], $B(E2)$ de [57], $B(E3)$ de [58] e r_{rms} de [59]. Os resultados experimentais de fatores de forma $|F(q)|^2$, para espalhamento elétron-núcleo elástico e inelástico, e densidades experimentais das transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$, para os núcleos considerados, foram tomados de: ^{12}C [60, 61, 62, 63, 64], ^{16}O [43, 63, 60], ^{24}Mg [51, 65, 66, 67, 68, 69], ^{28}Si [51, 70, 65, 68, 71],

^{32}S [51, 72], ^{40}Ca [73, 74, 75, 76], ^{48}Ca [77], ^{52}Cr [78, 79, 80, 81], ^{58}Ni [56, 82, 49, 83, 84], ^{64}Zn [85, 86, 87], ^{70}Ge [88], ^{76}Ge [88], ^{88}Sr [89, 90, 91], ^{90}Zr [92, 93, 90, 81, 94, 95, 96], ^{92}Mo [97, 93, 90, 81], ^{108}Pd [98, 99], ^{110}Pd [100, 99], ^{110}Cd [101], ^{120}Sn [81, 102], ^{142}Nd [103], ^{150}Nd [104, 105], ^{152}Sm [45, 52], ^{154}Gd [106], ^{166}Er [107, 52], ^{192}Os [42, 108], ^{194}Pt [108], ^{196}Pt [108, 109] e ^{208}Pb [56, 110, 111, 112, 113, 114].

Com o fim de descrever os resultados experimentais para cada núcleo com nossos cálculos teóricos, temos ajustados os correspondentes valores de $\tilde{\beta}_{20}$, b_2 , $\hbar\omega_2$, b_3 , R_0 e a . Para o parâmetro γ_0 são consideradas duas possibilidades (segundo o comentado no capítulo 1): $\gamma_0 = 0$ (forma prolata) ou $\gamma_0 = \pi/3$ (forma oblata). O método para obter esses parâmetros é descrito a seguir.

Dentro do GRVM, os valores teóricos de energia de excitação (E^*) dos estados 2_1^+ , 0_2^+ , 2_2^+ e 4_2^+ , dependem unicamente dos valores dos parâmetros $\tilde{\beta}_{20}$ e $\hbar\omega_2$ (os resultados com $\gamma_0 = 0$ ou $\pi/3$, no referente à energia de excitação, são iguais nesse cálculo). Assim sendo, os valores desses parâmetros são determinados fazendo com que os valores experimentais (obtidos de www.nndc.bnl.gov/nudat2/indx_adopted.jsp) e teóricos E^* de 2_1^+ coincidam (o que é sempre possível), e fazendo o melhor ajuste das energias dos estados do tripleto (0_2^+ , 2_2^+ e 4_2^+). Com esse propósito, definimos o desvio médio entre E^* teóricas e experimentais como:

$$\bar{\Delta} = \frac{1}{3} \left(\frac{|0_2^+ T - 0_2^+ E|}{0_2^+ E} + \frac{|2_2^+ T - 2_2^+ E|}{2_2^+ E} + \frac{|4_2^+ T - 4_2^+ E|}{4_2^+ E} \right) \times 100\%, \quad (5.0.1)$$

onde T e E representam os valores teórico e experimental da E^* dos respectivos níveis de energia. Os valores de E^* teóricos e experimentais para os estados de quadrupolo são apresentados na tabela 5.1. $\bar{\Delta}$ é assumido como um critério quantitativo e o ajuste dos parâmetros é feito tal que seja obtido um $\bar{\Delta}$ mínimo. De fato, o valor de $\bar{\Delta}$ obtido neste trabalho para a maioria de núcleos estudados é aceitável (pequeno). Existem exceções para os núcleos duplamente mágicos (com camadas fechadas) ^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca e ^{208}Pb , para os quais não é esperado que os modelos coletivos descrevam adequadamente a correspondente estrutura nuclear. Porém, o GRVM descreve as densidades desses núcleos de forma razoável, como discutido a frente.

Vamos dividir as análises de dados em duas partes: uma para núcleos deformados e outra

para núcleos não deformados, onde chamaremos de deformados os núcleos com $\tilde{\beta}_{20} \neq 0$ e de não deformados àqueles com $\tilde{\beta}_{20} = 0$. Em ambos casos os dados são analisados considerando termos em primeira ordem e também em segunda ordem na deformação.

Os valores dos parâmetros b_2 , b_3 , R_0 e a , foram então obtidos ajustando os dados correspondentes a: densidade do $g.s.$, $B(E2)$, $B(E3)$, r_{rms} , densidade de transição experimental e $|F(q)|^2$ para espalhamento elétron-núcleo elástico e inelástico das transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$. Nessa análise, o ajuste dos parâmetros é realizado com o propósito de descrever o conjunto completo dos diferentes tipos de dados, dando ênfase para a região de q pequenos e r na região da superfície nuclear.

A tabela 5.2 apresenta os valores desses parâmetros (R_0 , a , b_2 e b_3) obtidos dentro do contexto do GRVM, para os núcleos não deformados. Para esse tipo de núcleos, onde $\tilde{\beta}_{20} = 0$, o valor de γ_0 não influi no valor dos parâmetros, já que o efeito em (1.1.17) desaparece.

núcleo	1ª ordem				2ª ordem			
	R_0	a	b_2	b_3	R_0	a	b_2	b_3
^{12}C	2.23	0.49	0.283	0.437	2.33	0.34	0.306	0.535
^{16}O	2.57	0.50	0.165	0.374	2.64	0.39	0.172	0.426
^{32}S	3.25	0.58	0.149	0.258	3.28	0.49	0.155	0.285
^{40}Ca	3.64	0.56	0.053	0.201	3.66	0.51	0.054	0.209
^{48}Ca	3.77	0.53	0.052	0.140	3.78	0.49	0.052	0.144
^{52}Cr	3.98	0.53	0.107	0.093	3.99	0.49	0.108	0.096
^{58}Ni	4.17	0.55	0.088	0.117	4.19	0.51	0.088	0.119
^{64}Zn	4.29	0.58	0.112	0.128	4.32	0.53	0.113	0.131
^{70}Ge	4.39	0.61	0.110	0.158	4.43	0.54	0.111	0.165
^{88}Sr	4.83	0.57	0.056	0.113	4.83	0.53	0.057	0.117
^{90}Zr	4.85	0.57	0.045	0.119	4.88	0.52	0.045	0.125
^{92}Zr	4.90	0.56	0.049	0.107	4.91	0.54	0.049	0.108
^{92}Mo	4.93	0.55	0.052	0.106	4.93	0.53	0.052	0.103
^{120}Sn	5.44	0.54	0.052	0.078	5.44	0.52	0.052	0.079
^{142}Nd	5.72	0.57	0.045	0.089	5.74	0.54	0.045	0.089
^{208}Pb	6.61	0.56	0.027	0.069	6.63	0.54	0.026	0.069

Tabela 5.2: Valores dos parâmetros obtidos dentro do GRVM para os núcleos não deformados considerados no presente trabalho. As análises foram feitas considerando termos em primeira e segunda ordem de deformação na densidade nuclear. Os valores de R_0 e a são dados em fm , enquanto b_2 e b_3 são adimensionais.

Na tabela 5.3, são apresentados os mesmos parâmetros, mas para os núcleos deformados.

Nos cálculos usando termos de segunda ordem, a escolha do parâmetro γ_0 se mostra relevante, daqui que sejam apresentados dois valores diferentes de b_2 para cada núcleo deformado, correspondentes às formas prolata ($\gamma_0 = 0$) e oblata ($\gamma_0 = \pi/3$). Quando foram usados somente termos de primeira ordem, os resultados mostraram ser independentes do valor de γ_0 usado.

núcleo	$\tilde{\beta}_{20}$	1ª ordem				2ª ordem				
		R_0	a	b_2	b_3	R_0	a	b_2		b_3
								0	$\pi/3$	
²⁴ Mg	2.95	2.94	0.57	0.195	0.158	3.01	0.47	0.180	0.236	0.175
²⁸ Si	3.33	3.10	0.56	0.125	0.201	3.16	0.48	0.117	0.144	0.215
⁷⁶ Ge	0.95	4.53	0.58	0.124	0.087	4.55	0.52	0.120	0.124	0.090
¹⁰⁸ Pd	1.64	5.18	0.60	0.099	0.097	5.20	0.53	0.098	0.104	0.100
¹¹⁰ Pd	1.59	5.31	0.57	0.092	0.088	5.33	0.52	0.091	0.095	0.090
¹¹⁰ Cd	1.79	5.33	0.53	0.066	0.093	5.34	0.50	0.066	0.068	0.094
¹⁵⁰ Nd	4.04	5.73	0.64	0.078	0.072	5.78	0.55	0.071	0.085	0.073
¹⁵² Sm	4.17	5.96	0.62	0.076	0.055	5.96	0.52	0.071	0.087	0.058
¹⁵⁴ Gd	4.14	5.98	0.64	0.075	0.064	5.99	0.53	0.072	0.087	0.068
¹⁶⁶ Er	5.13	6.15	0.62	0.069	0.031	6.15	0.52	0.064	0.081	0.032
¹⁹² Os	2.13	6.45	0.58	0.061	0.037	6.45	0.56	0.061	0.066	0.038
¹⁹⁴ Pt	0.79	6.44	0.56	0.065	0.039	6.45	0.52	0.065	0.066	0.039
¹⁹⁶ Pt	1.00	6.44	0.56	0.059	0.032	6.46	0.53	0.058	0.059	0.032

Tabela 5.3: O mesmo da 5.2, para núcleos deformados. No caso de segunda ordem, são apresentados dois valores para b_2 , correspondentes às formas prolata ($\gamma_0 = 0$) e oblata ($\gamma_0 = \pi/3$).

Vamos tomar como primeiro exemplo o núcleo ¹⁶⁶Er, o mais deformado deste estudo ($\tilde{\beta}_{20} = 5.13$). Na figura 5.0.1, são apresentadas densidades de carga de transição e os fatores de forma respectivos, experimentais e GRVM, para o $g.s.$ e para a transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$. Os resultados GRVM foram obtidos levando em conta deformações de segunda ordem, e foram consideradas as formas prolata ($\gamma_0 = 0$) e oblata ($\gamma_0 = \pi/3$). No que respeita à densidade de $g.s.$ e fator de forma elástico, ambas escolhas ($\gamma_0 = 0$ ou $\gamma_0 = \pi/3$) resultaram em um ajuste bom quando comparados com os resultados experimentais, talvez sendo um pouco melhores para $\gamma_0 = 0$; porém sem ser determinante. Já no caso da densidade de transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$, os resultados do fator de forma GRVM com $\gamma_0 = 0$ (forma prolata) mostram claramente um melhor ajuste com o respectivo fator de forma experimental, principalmente no referente à posição do primeiro mínimo.

Figura 5.0.1: Esquerda: Densidades de carga, experimentais e GRVM, para o $g.s.$ e a transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$ do ^{166}Er . Direita: Fatores de forma das respectivas densidades de carga, calculados com o PWBA. Os resultados GRVM foram obtidos levando em conta deformações de segunda ordem, e consideradas as formas prolata ($\gamma_0 = 0$) e oblata ($\gamma_0 = \pi/3$).

Na figura 5.0.2 é apresentado um outro exemplo desse tipo de comportamento. Neste caso são apresentados resultados para o ^{24}Mg , o núcleo deformado mais leve considerado neste trabalho. Devido a que não há disponíveis densidades de transição experimentais $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$ para esse núcleo, são mostrados apenas dados experimentais do fator de forma. A densidade de transição GRVM $g.s. \rightarrow 3_1^-$ não depende do parâmetro γ_0 , por tal razão os resultados são iguais para a forma prolata ou oblata. Da mesma maneira que acontece no ^{166}Er , neste caso é fácil ver que o fator de forma GRVM com perfil prolato ajusta melhor os dados experimentais da transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$, especialmente a posição do primeiro mínimo. Esses resultados indicam que é possível distinguir entre formas prolata e oblata do núcleo através de experimentos de espalhamento elétron-núcleo.

Seguindo com as nossas análises, e depois de mostrar a relevância do parâmetro γ_0 , e por conseguinte da forma prolata ou oblata em núcleos deformados (onde são assumidos termos

Figura 5.0.2: Densidades de transição GRVM e fatores de forma de carga GRVM e dados experimentais, para o $g.s.$ e as transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$ do ^{24}Mg , considerando as formas prolata ($\gamma_0 = 0$) e oblata ($\gamma_0 = \pi/3$).

de segunda ordem em deformação), vamos apresentar resultados teóricos GRVM considerando termos de primeira ordem ou segunda ordem, que serão comparados com resultados experimentais de densidades de transição e fatores de forma.

Nas figuras 5.0.3 e 5.0.4, são apresentados os casos para os núcleos deformados já mostrados anteriormente, ^{166}Er e ^{24}Mg , calculados em primeira e segunda ordem de deformação, com os respectivos valores dos parâmetros (segundo a tabela 5.3) e com $\gamma_0 = 0$ (forma prolata). Também são mostrados os resultados em primeira ordem, porém com os parâmetros próprios de segunda ordem, denominado como 1^a (2^a ord.) nas figuras, para fins de comparação. Os resultados GRVM em primeira ordem ajustam bem os resultados experimentais, inclusive até um pouco melhor do que os resultados obtidos em segunda ordem. Isso não significa que

os efeitos de segunda ordem sejam desprezíveis (vide figura 5.0.7). Assim sendo, é possível obter ajustes bastantes bons dos resultados experimentais tanto em primeira ordem como em segunda ordem. As razões desse fato são analisadas a seguir.

Figura 5.0.3: O mesmo da figura 5.0.1, com os resultados GRVM calculados em primeira e segunda ordem com os respectivos parâmetros. Também são mostrados os resultados em primeira ordem, porém com os parâmetros próprios de segunda ordem.

Em nossas análises, temos começado por acertar os parâmetros GRVM de tal modo que tivéssemos um ajuste muito bom entre as densidades de *g.s.* teóricas e experimentais. Dentro do GRVM, a densidade de *g.s.*, dada na equação (4.1.5), tem contribuição de termos de segunda ordem, fazendo com que ajustes em primeira ou segunda ordem deem valores diferentes dos parâmetros R_0 , a , b_2 e b_3 , com o propósito de ajustar os resultados experimentais. Daqui pode-se observar que os valores de R_0 , b_2 e b_3 em cálculos com termos de primeira ordem são menores que aqueles obtidos com análises de segunda ordem, enquanto os valores de a aumentam (vide tabelas 5.2 e 5.3). Essa mudança no valor dos parâmetros em primeira

Figura 5.0.4: O mesmo da figura 5.0.2, com os resultados GRVM calculados em primeira e segunda ordem com os respectivos parâmetros. Também são mostrados os resultados em primeira ordem, porém com os parâmetros próprios de segunda ordem.

ordem compensa a ausência dos termos de segunda ordem na densidade $g.s.$ do GRVM. A densidade GRVM do $g.s.$ é mais sensível à variação de R_0 e a . De fato, b_2 e b_3 não estão presentes na expressão em primeira ordem. R_0 é acertado ajustando principalmente o primeiro mínimo do fator de forma elástico (o qual está relacionado com a densidade $g.s.$), enquanto a difusividade a é acertada levando em consideração o valor experimental de r_{rms} e a inclinação da densidade $g.s.$. Os valores de b_2 e b_3 são acertados ajustando a altura dos fatores de forma inelásticos $|F(q)|_{g.s. \rightarrow 2^+_1}^2$ e $|F(q)|_{g.s. \rightarrow 3^+_1}^2$ respectivamente, os quais estão relacionados por sua vez com os valores experimentais de $B(E2)$ e $B(E3)$.

Consideramos interessante assinalar as seguintes características de nossas análises: quando o valor da difusividade a aumenta, os valores de r_{rms} , $B(E2)$ e $B(E3)$ também aumentam.

No mesmo sentido, quando o valor de R_0 aumenta, os valores de r_{rms} , $B(E2)$ e $B(E3)$ também aumentam. Num sentido mais gráfico, quando a aumenta, a inclinação de $|F(q)|^2$ varia (tanto para o elástico como para o inelástico), no sentido que os máximos de $|F(q)|^2$ diminuem (vide figura 5.0.5). Quando R_0 aumenta, os picos de $|F(q)|^2_{g.s. \rightarrow g.s.}$ e de $|F(q)|^2_{g.s. \rightarrow 2_1}$

Figura 5.0.5: Comparação dos cálculos teóricos da densidade de carga para o $g.s.$ e dos fatores de forma elásticos e inelásticos para diferentes valores de difusividade a , comparados com dados experimentais para o ^{28}Si . Os valores de a são dados em fm.

ficam mais estreitos (com menor largura), como mostrado na figura 5.0.6.

Como comentado anteriormente, os ajustes das densidades de transição GRVM para o $g.s.$

Figura 5.0.6: Comparação dos cálculos teóricos da densidade de carga para o *g.s.* e dos fatores de forma elásticos e inelásticos para diferente valores do raio R_0 comparados com dados experimentais para o ^{28}Si . Os valores de R_0 são dados em fm.

e as transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$ coincidem, em geral, bastante bem com os resultados experimentais, tanto em primeira como segunda ordem de deformação. Porém, cálculos em primeira ou segunda ordem proporcionam valores diferentes para outras transições, como mostrado na figura 5.0.7 para o núcleo ^{166}Er nas transições $2_1^+ \rightarrow 4_2^+$, $0_2^+ \rightarrow 2_2^+$, $0_2^+ \rightarrow 4_2^+$ e $3_1^- \rightarrow 3_1^-$. Algumas dessas transições são nulas em primeira ordem, porém têm contribuições não nulas em segunda ordem. Assim sendo, podemos concluir que, de maneira geral, os cálculos realizados em primeira e em segunda ordem não são equivalentes.

Figura 5.0.7: Multipolos de transição GRVM para $2_1^+ \rightarrow 4_2^+$, $0_2^+ \rightarrow 2_2^+$, $0_2^+ \rightarrow 4_2^+$ e $3_1^- \rightarrow 3_1^-$, calculadas em primeira e segunda ordem de deformação.

A tabela 5.4 apresenta os valores teóricos (T) no contexto do GRVM, calculados em segunda ordem para, r_{rms} , $B(E2)$ e $B(E3)$. Também são apresentados as razões (T/E) teórico e experimental para $B(E2)$ e $B(E3)$. Vale a pena mencionar que os valores experimentais adotados $B(E2)$ e $B(E3)$ de [57, 58], representam uma média de vários valores obtidos através de diferentes métodos, os quais, em muitos casos, diferem significativamente uns de outros. Com exceção de alguns poucos núcleos (^{32}S , ^{40}Ca , ^{110}Pd , etc.), a tabela 5.4 mostra uma boa concordância entre valores experimentais e teóricos ($T/E \approx 1$), com diferenças compatíveis com as incertezas dos valores experimentais adotados.

Nas figuras 5.0.8 e 5.0.9 apresentamos a densidade de carga do *g.s.* experimental e GRVM, em primeira e segunda ordem, além dos correspondentes fatores de forma elástico, para vários núcleos do nosso estudo. Dentro dos núcleos escolhidos nestas figuras existem deformados e não deformados, os quais ilustram a boa concordância entre os resultados experimentais e teóricos obtidos neste trabalho. Podemos ver que as densidades GRVM, e consequentemente

núcleo	r_{rms} T	$B(E2)$ T	$B(E2)$ T/E	$B(E3)$ T	$B(E3)$ T/E
^{12}C	2.475	3.96×10^{-3}	1.00 ± 0.05	6.11×10^{-4}	1.00 ± 0.15
^{16}O	2.699	3.70×10^{-3}	1.00 ± 0.11	1.48×10^{-3}	1.00 ± 0.03
^{24}Mg	3.051	42.39×10^{-3}	0.97 ± 0.02	1.33×10^{-3}	0.88 ± 0.11
^{28}Si	3.132	32.61×10^{-3}	1.00 ± 0.02	3.52×10^{-3}	0.83 ± 0.12
^{32}S	3.248	28.78×10^{-3}	0.97 ± 0.02	0.98×10^{-2}	0.78 ± 0.16
^{40}Ca	3.477	8.14×10^{-3}	0.88 ± 0.07	1.47×10^{-2}	0.80 ± 0.11
^{48}Ca	3.477	0.83×10^{-2}	0.90 ± 0.09	0.78×10^{-2}	0.94 ± 0.24
^{52}Cr	3.624	6.23×10^{-2}	1.00 ± 0.04	6.53×10^{-3}	1.00 ± 0.06
^{58}Ni	3.801	6.82×10^{-2}	1.05 ± 0.02	1.82×10^{-2}	1.03 ± 0.09
^{64}Zn	3.938	14.64×10^{-2}	0.98 ± 0.03	3.06×10^{-2}	0.89 ± 0.15
^{70}Ge	4.046	17.72×10^{-2}	0.99 ± 0.02	0.64×10^{-1}	1.00 ± 0.16
^{76}Ge	4.078	27.87×10^{-2}	1.02 ± 0.01	0.21×10^{-1}	1.00 ± 0.33
^{88}Sr	4.259	8.93×10^{-2}	0.99 ± 0.03	6.90×10^{-2}	0.94 ± 0.04
^{90}Zr	4.264	6.35×10^{-2}	0.99 ± 0.05	9.06×10^{-2}	0.92 ± 0.05
^{92}Zr	4.326	7.81×10^{-2}	0.98 ± 0.05	7.00×10^{-2}	1.03 ± 0.28
^{92}Mo	4.322	9.78×10^{-2}	1.00 ± 0.04	0.73×10^{-1}	1.01 ± 0.29
^{108}Pd	4.552	7.57×10^{-1}	0.99 ± 0.03	1.08×10^{-1}	0.99 ± 0.16
^{110}Pd	4.613	6.98×10^{-1}	0.81 ± 0.03	0.98×10^{-1}	1.01 ± 0.16
^{110}Cd	4.908	4.17×10^{-1}	0.98 ± 0.05	1.15×10^{-1}	1.00 ± 0.11
^{120}Sn	4.658	1.98×10^{-1}	1.00 ± 0.02	1.00×10^{-1}	0.87 ± 0.13
^{142}Nd	4.908	0.263	0.99 ± 0.05	2.50×10^{-1}	1.00 ± 0.08
^{150}Nd	5.033	2.712	1.00 ± 0.01	1.77×10^{-1}	1.00 ± 0.11
^{152}Sm	5.094	3.415	0.99 ± 0.01	1.36×10^{-1}	1.00 ± 0.11
^{154}Gd	5.132	3.783	0.98 ± 0.01	2.06×10^{-1}	0.98 ± 0.24
^{166}Er	5.239	5.699	0.99 ± 0.02	0.59×10^{-1}	0.97 ± 0.16
^{192}Os	5.441	2.066	1.02 ± 0.05	1.40×10^{-1}	1.07 ± 0.07
^{194}Pt	5.381	1.681	1.03 ± 0.04	1.49×10^{-1}	1.23 ± 0.06
^{196}Pt	5.396	1.418	1.01 ± 0.05	1.02×10^{-1}	1.00 ± 0.04
^{208}Pb	5.485	2.82×10^{-1}	0.98 ± 0.06	6.13×10^{-1}	1.00 ± 0.01

Tabela 5.4: Valores teóricos GRVM (T), calculados em segunda ordem, para r_{rms} (fm), $B(E2)$ (e^2b^2) e $B(E3)$ (e^2b^3). Também são apresentados as razões entre $B(E2)$ e $B(E3)$ teórico (T) e experimental (E). As incertezas dos valores experimentais de $B(E2)$ e $B(E3)$ nessas razões, correspondem aos valores adotados em [57, 58].

os fatores de forma, tanto em primeira como em segunda ordem, são muito similares às experimentais, mesmo para núcleos que não eram esperados de ter uma boa descrição com o GRVM, devido ao grande valor do $\bar{\Delta}$ correspondente (vide tabela 5.1), tais como o ^{40}Ca e ^{208}Pb . De fato, os valores experimentais e teóricos do r_{rms} , associados às densidades do $g.s.$, estão de acordo dentro de 2% de precisão para todos os núcleos (vide tabela 5.4).

As figuras 5.0.10 e 5.0.11 apresentam densidades de transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e os correspon-

Figura 5.0.8: Densidades de carga experimentais e GRVM, em primeira e segunda ordem, para o *g.s.* dos núcleos ^{32}S , ^{40}Ca , ^{52}Cr , ^{58}Ni e ^{70}Ge . Na coluna da direita são apresentados os respectivos fatores de forma elásticos calculados dentro da aproximação PWBA.

dentes fatores de forma experimentais e GRVM, calculados em primeira e segunda ordem de deformação, para vários núcleos. A figura 5.0.12 apresenta o mesmo que as duas figuras

Figura 5.0.9: O mesmo da figura 5.0.8, para os núcleos ^{88}Sr , ^{108}Pd , ^{120}Sn , ^{152}Sm e ^{208}Pb .

anteriores, só que para a transição $g.s. \rightarrow 3_1^-$. Em ambos casos, as densidades de transição GRVM concordam razoavelmente bem com as experimentais. Porém, os primeiros mínimos dos fatores de forma das transições nem sempre coincidem, como feito no ajuste de

parâmetros para o fator de forma elástico. Em ambos casos, para o cálculo dos fatores de forma inelásticos foram usadas as densidades de transição do GRVM, das equações (4.1.10) e (4.1.11) respectivamente, dentro da aproximação PWBA. Com esses dados experimentais foram ajustados os parâmetros b_2 e b_3 , dando maior peso à região de q pequeno.

Como casos particulares de núcleos nos quais o GRVM não funciona bem, temos o ^{12}C e o ^{16}O . Na figura 5.0.13 são apresentadas as densidades experimentais e GRVM, em primeira e segunda ordem, e os correspondentes fatores de forma para o ^{16}O . Pode-se observar que os cálculos GRVM em segunda ordem não conseguem descrever satisfatoriamente os resultados experimentais. Isso é devido à grande amplitude de vibração (grandes valores de b_2 e b_3), e daí que a expansão até segunda ordem não é precisa o suficiente para dar uma descrição adequada das densidades. Um melhor ajuste, na densidade de $g.s.$ e fator de forma, é obtido quando são feitos os cálculos só em primeira ordem (com os correspondentes parâmetros). Isso funciona, de fato, já que quando os termos de segunda ordem são desligados na equação (4.1.5) a expressão para a densidade de $g.s.$ é descrita por uma densidade não deformada, a qual corresponde à bem conhecida função de Fermi. Assim sendo, no nosso caso de estudo para os núcleos ^{12}C e ^{16}O , se somente houver interesse na densidade do $g.s.$ e nas transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$, os cálculos e parâmetros de primeira ordem devem ser usados, já que eles dão melhores resultados que os de segunda ordem.

Como foi comentado anteriormente, uma sistemática para o raio de carga e a difusividade (vide equações (1.1.11) e (1.1.12)) no contexto do GRVM foi apresentada em [1]. Na presente tese, apresentamos uma nova sistemática, onde foi levada em consideração um maior número de dados experimentais do que na sistemática anterior, tais como densidades de transição, fatores de forma elástico e inelástico experimentais. Essa nova sistemática também levou em consideração as modificações feitas no tratamento dos parâmetros γ_0 e β_{30} no GRVM. Dessa maneira, a presente análise é mais completa e precisa.

A figura 5.0.14 (esquerda) apresenta os valores de difusividade obtidos de ajustes do GRVM em segunda ordem, segundo as tabelas 5.2 e 5.3, como função da massa nuclear A , onde os núcleos deformados e não deformados são representados por símbolos diferentes. A expressão 1.1.12, obtida na sistemática anterior (linha preta na figura), também descreve

satisfatoriamente os resultados do presente trabalho, exceto para os núcleos ^{12}C e ^{16}O . Na mesma figura 5.0.14 (direita), são apresentados o raio R_0 da densidade de carga obtidos dos cálculos GRVM em segunda ordem (vide tabelas 5.2 e 5.3), subtraindo o correspondente termo ΔR_0 da equação (1.1.11), como uma função de $Z^{1/3}$. A linha tracejada nesta figura representa a equação (1.1.11), enquanto o resultado do presente trabalho é melhor descrito por (linha contínua na figura):

$$R_0 = 1.60 Z^{1/3} - 0.74 + \Delta R_0 . \quad (5.0.2)$$

Figura 5.0.10: Densidades de carga experimentais e GRVM em primeira e segunda ordem para a transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$ dos núcleos ^{48}Ca , ^{64}Zn , ^{76}Ge , ^{90}Zr e ^{92}Mo . Na coluna da direita são apresentados os respectivos fatores de forma calculados dentro da aproximação PWBA.

Figura 5.0.11: O mesmo da figura 5.0.10, para ^{110}Cd , ^{142}Nd , ^{154}Gd , ^{192}Os e ^{208}Pb .

Figura 5.0.12: Densidades de carga experimentais e GRVM para a transição $g.s. \rightarrow 3_1^-$ dos núcleos ^{48}Ca , ^{92}Mo , ^{142}Nd , ^{194}Pt e ^{208}Pb . Na coluna da direita são apresentados os respectivos fatores de forma calculados dentro da aproximação PWBA.

Figura 5.0.13: Densidades de carga experimentais e GRVM, calculadas em primeira e segunda ordem, para o $g.s.$ e as transições $g.s. \rightarrow 2_1^+$ e $g.s. \rightarrow 3_1^-$ do ^{16}O . Na coluna da direita são apresentados os respectivos fatores de forma calculados dentro da aproximação PWBA.

Figura 5.0.14: Esquerda: valores de difusidade para núcleos deformados e não deformados obtidos de ajustes do GRVM em segunda ordem como função da massa nuclear A . A linha preta corresponde à expressão (1.1.12). Direita: valores de $R_0 - \Delta R_0$ para a densidade de carga como função de $Z^{1/3}$. As linhas continua preta e vermelha tracejada correspondem às expressões (5.0.2) e (1.1.11), respectivamente.

Capítulo 6

Comparação entre alguns modelos microscópicos e o GRVM

Sumário

6.1 Densidades GRVM e DHB	65
6.1.1 Densidades médias do g.s. no sistema de referência de laboratório .	66

Numa outra abordagem teórica, o cálculo de densidades nucleares pode ser realizado com modelos microscópicos. Por exemplo, em [115] são realizados cálculos baseados no método Hartree–Fock–BCS (HFB), e apresenta resultados para mais de 9000 núcleos, tais como os parâmetros de deformação de quadrupolo e hexadecapolo no sistema de referência intrínseco.

Em [116] foram obtidos os parâmetros de deformação de quadrupolo β_2 , de cálculos feitos com o modelo Dirac-Hartre-Bogoliuvov (DHB) [13]. Na tabela 6.1, apresentamos uma comparação entre os parâmetros $\beta_{20} = \tilde{\beta}_{20} \times b_2$ do GRVM com os β_2 dos modelos HFB e DHB. A parte esquerda da tabela apresenta os núcleos não deformados segundo o GRVM, porém não necessariamente esféricos nos outros modelos; enquanto na parte direita são apresentados os núcleos deformados segundo o GRVM, com valores de β_{20} obtidos em primeira e segunda ordem. No caso dos cálculos GRVM em segunda ordem, foram usados os valores de $\gamma_0 = 0$ (forma prolata) e $\gamma_0 = \pi/3$ (forma oblata), sendo que o valor de β_{20} que melhor ajusta os dados experimentais para cada núcleo é indicado por um asterisco (onde a distinção pode ser feita). Os sinais (+) e (-) para o valor de β_2 nos cálculos HFB e DHB, são associados

às formas prolata e oblata, respectivamente. Nos casos onde os cálculos DHB resultaram em dois valores de β_2 , indicamos com um asterisco o mínimo de mais baixa energia.

núcleo	HFB	DHB	núcleo	1 ^a ord.	2 ^a ord.		HFB	DHB
					0	$\pi/3$		
¹² C	-	0	²⁴ Mg	0.58	0.53*	0.69	+0.50	+0.50
¹⁶ O	0	0	²⁸ Si	0.42	0.39*	0.48	-0.33	-0.34
³² S	+0.12	0 +0.23*	⁷⁶ Ge	0.12	0.11	0.12	+0.17	+0.18
⁴⁰ Ca	-0.01	0	¹⁰⁸ Pd	0.16	0.16	0.17	+0.20	-0.26* +0.21
⁴⁸ Ca	-0.14	0	¹¹⁰ Pd	0.15	0.15	0.15	+0.20	-0.24* +0.23
⁵² Cr	+0.16	+0.15	¹¹⁰ Cd	0.12	0.12	0.12	+0.15	-0.26 +0.17*
⁵⁸ Ni	-0.17	+0.13	¹⁵⁰ Nd	0.32	0.29*	0.34	+0.25	+0.23
⁶⁴ Zn	-0.18	-0.24 +0.23*	¹⁵² Sm	0.32	0.29*	0.35	+0.26	+0.29
⁷⁰ Ge	-0.21	-0.16	¹⁵⁴ Gd	0.31	0.29*	0.35	+0.27	+0.26
⁸⁸ Sr	0	0	¹⁶⁶ Er	0.35	0.33*	0.42	+0.32	-0.24
⁹⁰ Zr	0	0	¹⁹² Os	0.13	0.13	0.13	-0.19	-0.16
⁹² Mo	0	0	¹⁹⁴ Pt	0.05	0.05	0.05	-0.12	-0.15
¹²⁰ Sn	0	0	¹⁹⁶ Pt	0.06	0.06	0.06	0	-0.14
¹⁴² Nd	0	0						
²⁰⁸ Pb	0	0						

Tabela 6.1: Esquerda: valores β_2 calculados nos modelos HFB e DHB para o caso de núcleos não deformados segundo o GRVM ($\beta_{20} = 0$). Direita: valores β_{20} do GRVM em primeira e segunda ordem (com $\gamma_0 = 0$ e $\gamma_0 = \pi/3$), comparado com os valores de β_2 dos cálculos HFB e DHB.

Para a maioria de núcleos deformados, os β_{20} do GRVM estão em acordo razoável com os β_2 calculados nos modelos HFB e/ou DHB. O único núcleo que mostrou uma diferença marcante foi o ²⁸Si, para o qual os cálculos GRVM indicam uma forma prolata enquanto que os HFB e DHB indicam uma forma oblata. Para os núcleos não deformados, discrepâncias significativas foram observadas para ³²S, ⁵²Cr, ⁵⁸Ni, ⁶⁴Zn e ⁷⁰Ge, para os quais os modelos HFB e DHB fornecem valores de β_2 não nulos. Porém, para a maioria desses núcleos (exceto o ⁷⁰Ge), a tabela 5.1 mostra que os níveis de energia experimentais são compatíveis com o modelo vibracional puro ($\tilde{\beta}_{20} = 0$) com $\bar{\Delta} \approx 10\%$ de precisão.

6.1 Densidades GRVM e DHB

No capítulo anterior foram feitas algumas análises de dados experimentais de espalhamento elétron-núcleo usando o GRVM. Isso serviu para testar as densidades de carga teóricas do GRVM, associadas à distribuição de prótons do núcleo.

Nesta seção, “testamos” a densidade de nêutrons GRVM. Sem poder usar dados experimentais, como no caso do espalhamento elétron-núcleo, podemos comparar as densidades de matéria, associada aos nêutrons, calculadas teoricamente no GRVM e no DHB.

Os cálculos DHB fornecem, para cada núcleo estudado, as distribuições de prótons e nêutrons do *g.s.*; enquanto os resultados GRVM são dados como densidades de carga (prótons) e matéria (prótons + nêutrons). Assim sendo, e com o propósito de comparar os resultados do GRVM com o DHB, transformamos as distribuições de prótons e nêutrons DHB nas correspondentes densidades de carga (prótons) e de matéria (nêutrons).

A densidade de carga do núcleo no *g.s.* $\rho_{carga}^{g.s.}(\vec{r})$, está relacionada com a respectiva distribuição de protons $\rho_{protons}^{g.s.}(\vec{r})$, através da convolução com a densidade de carga de um próton $\rho_{carga-proton}(\vec{r})$:

$$\rho_{carga}^{g.s.}(\vec{r}) = \int \rho_{protons}^{g.s.}(\vec{r}') \rho_{carga-proton}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}', \quad (6.1.1)$$

sendo

$$\rho_{carga-proton}(\vec{r}) = \rho_0 e^{-\frac{|\vec{r}|}{a}}, \quad (6.1.2)$$

onde $\rho_0 = 1/8\pi a^3$ e $a = 0.235\text{fm}$ [16].

De maneira análoga, definimos uma densidade de matéria (dos nêutrons) fazendo a convolução da correspondente distribuição de nêutrons com a densidade de matéria de um nêutron:

$$\rho_{matéria(neutrons)}^{g.s.}(\vec{r}) = \int \rho_{neutrons}^{g.s.}(\vec{r}') \rho_{matéria-neutron}(\vec{r} - \vec{r}') d\vec{r}', \quad (6.1.3)$$

onde assumimos que $\rho_{matéria-neutron}(\vec{r}) = \rho_{carga-proton}(\vec{r})$. A densidade de matéria total do GRVM, a ser usada em cálculos CC, vai ser uma simples soma entre a densidade de carga dos prótons com a densidade de matéria dos nêutrons.

Para um dado núcleo, nos cálculos GRVM de densidade de carga e matéria, assumimos exatamente os mesmos valores para todos os parâmetros, exceto para o raio R_0 . Vamos assumir que essa diferença entre os raios das densidades de prótons (carga) e nêutrons (matéria) está relacionada com Z (número de prótons do núcleo) e N (número de nêutrons do núcleo) por:

$$R_0^{\text{nêutron}} - R_0^{\text{próton}} \approx 0.5 (N^{1/3} - Z^{1/3}). \quad (6.1.4)$$

Nos nossos cálculos temos adotamos (6.1.4) e, portanto, nossas análises também representam um teste dessa expressão.

6.1.1 Densidades médias do g.s. no sistema de referência de laboratório

Definimos a densidade média de um estado $\phi_{\eta IM}$ de maneira geral, no sistema de referência de laboratório, como:

$$\rho_{\eta IM}(\vec{r}) = \langle \phi_{\eta IM} | \rho(\vec{r}) | \phi_{\eta IM} \rangle = \sum_{\lambda\mu} C_{M\mu M}^{I\lambda I} \rho_{\lambda}^{\eta; I \rightarrow \eta; I}(r) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_r). \quad (6.1.5)$$

Para o $g.s.$, a densidade de transição reduzida só tem componente $\lambda = 0$, indicando isso, de (3.1.5) e (3.1.11), que a densidade média é simetricamente esférica, como mostrado em (4.1.5) e (4.1.6):

$$\begin{aligned} \rho_{g.s.}(r) &= \langle \phi_{g.s.} | \rho(\vec{r}) | \phi_{g.s.} \rangle = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}(r) \\ &= \rho_{nd}(r) + \frac{\langle \beta_2^2 \rangle + \langle \beta_3^2 \rangle}{8\pi} \left[\partial^2 \rho(r) - \left(\frac{\int \partial^2 \rho(r) r^2 dr}{\int \partial \rho(r) r^2 dr} \right) \partial \rho(r) \right], \end{aligned} \quad (6.1.6)$$

$$\langle \beta_{\lambda}^2 \rangle \equiv \langle \phi_{g.s.} | \beta_{\lambda}^2 | \phi_{g.s.} \rangle = b_{\lambda}^2 \int |\chi_{g.s.}^{(\lambda)}|^2 \tilde{\beta}_{\lambda}^2 d\tau_{\lambda}. \quad (6.1.7)$$

A figura 6.1.1 apresenta os resultados para as densidades médias no $g.s.$ de carga (prótons-coluna esquerda) e matéria (nêutrons-coluna direita) calculados no GRVM e DHB. São mostrados, como exemplo, os núcleos ^{40}Ca , ^{208}Pb (núcleos não deformados) e ^{108}Pd , ^{152}Sm (núcleos deformados). Podemos ver que ambas densidades teóricas, para prótons e nêutrons, nos modelos GRVM e DHB são bastante similares, sobretudo na região da superfície nuclear.

Figura 6.1.1: Densidades médias do *g.s.* de carga (prótons) e matéria (nêutrons) calculados com os modelos GRVM (curva tracejada) e DHB (curva pontilhada), para os núcleos ^{40}Ca , ^{208}Pb (núcleos não deformados) e ^{108}Pd , ^{152}Sm (núcleos deformados). No caso da densidade de carga, são mostrados também os resultados experimentais (curva contínua).

Essa região é de fato a mais importante no nosso caso, para os cálculos de potenciais que serão usados para sistemas de núcleos pesados em cálculos CC.

Esses resultados também suportam nossas suposições feitas *a priori* de que a densidade de prótons (associada à densidade de carga) e a densidade de nêutrons (associada à densidade de matéria) têm difusividades aproximadamente iguais, e que o valor de R_0 para nêutrons está de acordo a expressão (6.1.4).

Capítulo 7

Efeitos de aproximações usuais em cálculos de canais acoplados, no cálculo de densidades de transição

Os modelos rotacional e vibracional puros são adotados em muitos trabalhos, para o cálculo da interação Coulombiana, assumindo a aproximação *sharp-surface* (de corte abrupto), onde uma difusividade nula é assumida para a distribuição de carga.

Neste capítulo, pretendemos mostrar algumas diferenças e efeitos que traz considerar ou não uma difusividade nula nos cálculos de densidades de transição e, conseqüentemente, nas magnitudes calculadas com essas densidades, tais como fatores de forma e probabilidades de transição $B(E\lambda)$.

Para focar-nos num exemplo, vamos considerar o caso do modelo rotacional só com o modo de quadruplo e o raio expandido em primeira ordem na deformação (suposição feita em muitos trabalhos). Nesse caso temos:

$$\rho(\vec{r}) = \epsilon_0 H[R(\theta) - r], \quad (7.0.1)$$

onde $\epsilon_0 = Z/(\frac{4}{3}\pi R_0^3)$ é a constante de normalização, e $H(x)$ é a função de Heaviside

$$H(x) = \begin{cases} 0 & \text{para } x < 0 \\ 1 & \text{para } x > 0 \end{cases} \quad (7.0.2)$$

O raio nuclear está relacionado ao parâmetro de deformação β_2 por:

$$R(\theta) = R_0 [1 + \beta_2 Y_{20}(\theta)]. \quad (7.0.3)$$

Nesse contexto, uma expressão analítica é obtida para a correspondente probabilidade de transição $g.s. \rightarrow 2_1^+$ [54]:

$$B(E2, g.s. \rightarrow 2_1^+) = e^2 \left(\frac{3Z}{4\pi} \beta_2 R_0^2 \right)^2. \quad (7.0.4)$$

As correspondentes densidades de transição são dadas por:

$$\rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}(r) = \frac{3Z}{(4\pi)^{1/2} R_0^3} H[R_0 - r], \quad (7.0.5)$$

$$\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1^+}(r) = \frac{3Z}{4\pi R_0^2} \frac{\beta_2}{\sqrt{5}} \delta(r - R_0), \quad (7.0.6)$$

onde a delta de Dirac de (7.0.6) resulta da primeira derivada da função de Heaviside.

No caso do modelo vibracional, a expressão (7.0.4) ainda é válida, porém, trocando β_2 por $\sigma_2 = \sqrt{5} b_2$. Daqui podemos definir o comprimento de deformação como:

$$\delta_2 = \begin{cases} \beta_2 R_0 & \text{para o modelo rotacional,} \\ \sigma_2 R_0 & \text{para o modelo vibracional.} \end{cases} \quad (7.0.7)$$

Com as densidades dadas em (7.0.5) e (7.0.6), podemos ainda calcular os fatores de forma na aproximação PWBA, usando a expressão (4.1.8). Nesse caso obtemos:

$$|F(q)|_{elas}^2 = \frac{9 [\sin(qR_0) - qR_0 \cos(qR_0)]^2}{(qR_0)^6}, \quad (7.0.8)$$

$$|F(q)|_{g.s. \rightarrow 2_1^+}^2 = \frac{[3 \beta_2 j_2(qR_0)]^2}{4\pi}. \quad (7.0.9)$$

sendo $j_2(qR_0)$ a função esférica de Bessel de ordem 2.

Na figura 7.0.1 (esquerda), são apresentadas as densidades de transição $\rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}$ e $\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1^+}$ experimentais (curvas contínuas), GRVM em segunda ordem (curvas tracejadas), (7.0.5) e (7.0.6) (curvas pontilhadas), para o núcleo ^{166}Er . A curva pontilhada para a densidade de

transição $\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1^+}$ é só uma representação da função delta de Dirac em (7.0.6). No lado direito da mesma figura, apresentamos os respectivos factores de forma correspondentes às densidades do lado esquerdo da figura, calculados na aproximação PWBA. Esses resultados ilustram as limitações da aproximação *sharp-surface* na descrição de alguns resultados experimentais.

Figura 7.0.1: Esquerda: densidades de transição $\rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}$ e $\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1^+}$ experimentais (curvas contínuas) e GRVM em segunda ordem (curvas tracejadas) para o núcleo ^{166}Er . As equações (7.0.5) e (7.0.6) que descrevem o modelo *sharp-surface* são identificadas pelas curvas pontilhadas. Direita: factores de forma correspondentes às densidades do lado esquerdo da figura, calculados na aproximação PWBA.

Em vários trabalhos que envolvem análises de dados de íons-pesados através de cálculos CC, são usados os valores experimentais de $B(E2, g.s. \rightarrow 2_1^+)$ e a expressão (7.0.4) para obter os parâmetros de deformação. Esses valores são então utilizados para calcular os correspondentes potenciais de acoplamento da interação nuclear. Porém, como assinalado em [1], em alguns casos esse procedimento pode resultar numa superestimativa do acoplamento

nuclear. A seguir discutiremos esse assunto um pouco mais em detalhe.

As densidades não deformadas $\rho_{nd}(x)$ de (4.2.12) e (4.2.13) podem ser aproximadas, com muito boa precisão, pela função $C(x)$ definida em [16]:

$$\rho_{nd}(r) = \frac{\epsilon_0}{1 + e^x} \approx \epsilon_0 \times \begin{cases} 1 - \frac{7}{8}e^x + \frac{3}{8}e^{2x} & \text{para } x \leq 0 \\ e^{-x} \left(1 - \frac{7}{8}e^{-x} + \frac{3}{8}e^{-2x}\right) & \text{para } x \geq 0 \end{cases} \quad (7.0.10)$$

onde $x = (r - R_0)/a$. Substituindo (7.0.10) em (4.2.13), as integrais podem ser resolvidas analiticamente. Adicionalmente, dado que $a \ll R_0$, esse resultado pode ser expandido em série de potências de a/R_0 , até segunda ordem, como

$$B(E2, g.s. \rightarrow 2_1^+) \approx e^2 \left[\frac{3Z}{4\pi} \sigma_2 C_2 R_0^2 \right]^2, \quad (7.0.11)$$

onde temos definido um fator de correção devido ao valor finito da difusividade como:

$$C_2 = 1 + \frac{77}{8} \frac{a^2}{R_0^2} \approx 1 + \frac{2.4}{R_0^2}. \quad (7.0.12)$$

Em (7.0.12), assumimos que $a \approx 0.5$ fm. É de destacar que (7.0.11) se torna igual a (7.0.4) para um valor de difusividade nulo. Procedendo de forma análoga para o modo de octupolo (4.2.12), obtemos [1]:

$$B(E3, g.s. \rightarrow 3_1^-) \approx e^2 \left[\frac{3Z}{4\pi} \sigma_3 C_3 R_0^3 \right]^2, \quad (7.0.13)$$

com

$$C_3 = 1 + \frac{539}{24} \frac{a^2}{R_0^2} \approx 1 + \frac{5.6}{R_0^2}. \quad (7.0.14)$$

Consideremos agora o caso de cálculos CC para um sistema de íons pesados. Quando o parâmetro de deformação é estimado usando o valor experimental de $B(E2)$ através de (7.0.4), o correspondente β_2 é claramente superestimado por um fator relacionado com C_2 de (7.0.11). Nenhum problema sério aparece se esse valor de β_2 é usado somente no cálculo da interação Coulombiana (e correspondentes acoplamentos) consistentemente, dentro da aproximação *sharp-surface*. Porém, se o mesmo valor de β_2 (ou δ_2) é assumido no cálculo da interação nuclear, os correspondentes acoplamentos podem ser grandemente sobrestimados, sendo maior para núcleos leves (valores de R_0 menores), como visto de (7.0.12) e (7.0.14).

O procedimento descrito acima tem sido usado em vários artigos. Vamos comentar um exemplo disso.

Em [117], os potenciais de polarização para os sistemas $^{16}\text{O} + ^{58,62}\text{Ni}$ foram estudados através de cálculos CC. Uma das conclusões daquele artigo estava relacionada com os efeitos (considerados muito importantes) do estado 3^- do ^{16}O nos potenciais de polarização. Para o estado 3^- do ^{16}O , um comprimento de deformação de $\delta_3 = 2.15$ fm (derivado do correspondente valores experimental de $B(E3)$, usando $R_0 \approx 3$ fm) foi assumido nos cálculos dos acoplamentos nucleares naquele trabalho. Note-se que o fator de correção (7.0.14) calculado com $R_0 \approx 3$ fm é $C_3 \approx 1.6$. Por outro lado, como discutido no capítulo 5, os cálculos GRVM em primeira ordem oferecem uma razoável descrição das densidade de transição e do fator de forma para o estado 3^- do ^{16}O , com $\delta_3 = \sigma_3 R_0 = \sqrt{3} b_3 R_0 = 1.66$ fm (onde temos usado o fato de que $\sigma_3 = \sqrt{3} b_3$ no GRVM). Assim sendo, o valor δ_3 adotado em [117] é superestimado em mais de 30% com respeito ao valor obtido com o GRVM. Trataremos de novo desse caso no próximo capítulo.

Capítulo 8

Análises de espalhamento elástico, inelástico e de fusão através de cálculos de canais acoplados no contexto do GRVM

Sumário

8.1	Análises de dados	75
------------	--------------------------	-----------

Neste capítulo, apresentamos os resultados finais da tese, cujo objetivo principal era desenvolver o formalismo de canais acoplados dentro do contexto do GRVM e realizar análises de espalhamento elástico, inelástico e de fusão para sistemas de íons-pesados. Como exemplo de tudo isso, faremos as análises do sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$, mencionado no final do capítulo anterior. Esse sistema foi escolhido devido à disponibilidade de dados de espalhamento elástico, inelástico e de fusão para diferentes valores de energia de bombardeio em torno da barreira de potencial. São estudados os efeitos dos acoplamentos inelásticos e de diferentes interações nucleares em cálculos CC.

8.1 Análises de dados

Para fazer as análises de dados e os respectivos cálculos CC, foi usado o programa CCGRVM, feito pelo professor Luiz Carlos Chamon e escrito em FORTRAN. Este programa leva em

conta o formalismo do GRVM e resolve numericamente as equações diferenciais acopladas do capítulo 2, segundo o procedimento descrito no apêndice D. As densidades de transição para o ^{58}Ni foram calculadas levando em conta termos de segunda ordem, enquanto as do ^{16}O foram calculadas só com termos de primeira ordem, segundo os parâmetros da tabela 5.2.

Consideramos duas possibilidades para a interação núcleon-núcleon: o recentemente proposto potencial alpha [118], e para efeitos de comparação, também o potencial de São Paulo [16]. A interação nuclear assumida em (1.2.1) no cálculo do potencial nuclear, no caso do potencial de São Paulo, para baixas energias, é dada por $v(\vec{r}) = V_0 \delta(\vec{r})$, com $V_0 = -456 \text{ MeV fm}^3$. No caso do potencial alpha, a interação é dada por $v(\vec{r}) = -U_0 e^{-(|\vec{r}|/a)^2}$, com $U_0 = 87.226 \text{ MeV}$ e $a = 0.95 \text{ fm}$.

O potencial imaginário, acrescentado na parte diagonal do potencial nuclear, é assumido de ter forma do tipo Woods-Saxon,

$$W(R) = -\frac{W_0}{1 + \exp[(R - R_{I0})/a_I]} \quad (8.1.1)$$

com parâmetros dados por: $W_0 = 100 \text{ MeV}$, $R_{I0} = r_{I0} (A_1^{1/3} + A_2^{1/3})$, $r_{I0} = 0.8 \text{ fm}$ e $a_I = 0.25 \text{ fm}$ [119].

Os canais considerados na análise CC são dados na tabela 2.1, sendo as energias de excitação de cada estado para o ^{16}O : 2_1^+ (6.917 MeV), 0_2^+ (6.049 MeV), 2_2^+ (9.845 MeV), 4_2^+ (10.356 MeV) e 3_1^- (6.129 MeV); e para o ^{58}Ni : 2_1^+ (1.454 MeV), 0_2^+ (2.943 MeV), 2_2^+ (2.775 MeV), 4_2^+ (2.459 MeV) e 3_1^- (4.475 MeV).

Com isso, não temos nenhum parâmetro ajustável nas análises dos dados e tratamos, assim, de previsões teóricas ao invés de simples ajustes de dados experimentais.

A figura 8.1.1 apresenta as distribuições angulares de espalhamento elástico obtidas para energias de laboratório de 40, 42, 50 e 60 MeV. Os dados experimentais foram obtidos de [120, 121]. As linhas pretas contínuas correspondem aos resultados de cálculos CC, usando o potencial alpha e acoplando os 10 canais inelásticos (estados excitados) correspondentes ao projétil e alvo (além do canal elástico). As linhas azuis tracejadas representam os resultados sem nenhum canal inelástico acoplado. As linhas vermelhas contínuas correspondem ao

acoplamento dos 10 canais, porém, desta vez, usando o potencial de São Paulo. Claramente, os resultados obtidos com o potencial alpha são melhores do que aqueles com o potencial de São Paulo. A figura 8.1.1 também mostra que, quanto maior o número de canais envolvidos nos cálculos CC, a descrição dos dados experimentais se torna melhor, abaixando a seção de choque na região do máximo e aproximando os dados experimentais para ângulos maiores. O número máximo de canais considerados no GRVM não consegue descrever de maneira totalmente satisfatória os dados experimentais para ângulos traseiros, indicando que outros canais não considerados no GRVM são importantes.

A figura 8.1.2 apresenta as distribuições angulares de espalhamento inelástico para o estado excitado $2_1^+(1.454 \text{ MeV})$ do ^{58}Ni , obtidas para energias de laboratório de 37, 42, 50 e 60 MeV. Os dados experimentais foram obtidos em [122, 123, 121]. A notação de linhas e cores é a mesma da figura 8.1.1. No caso de nenhum acoplamento, as seções de choque foram obtidas por DWBA. Considerando que não existe parâmetro livre para o ajuste de dados, os resultados dos cálculos CC estão em acordo razoável com os dados.

Nas figuras 8.1.3 e 8.1.4, são apresentados os resultados para o espalhamento elástico, e inelástico dos estados $2_1^+(1.45 \text{ MeV})$ e $4_2^+(2.45 \text{ MeV})$ do ^{58}Ni , em $E_{lab} = 46 \text{ MeV}$. Os dados experimentais foram tomados de [124]. Nos cálculos CC, foi usado o potencial alpha e consideradas 8 diferentes combinações de estados inelásticos acoplados, denominados *set 1-8* e especificados na tabela 8.1.

set	projétil	alvo
1	—	—
2	3_1^-	—
3	$2_1^+, 3_1^-$	—
4	—	$2_1^+, 3_1^-$
5	$2_1^+, 0_2^+, 2_2^+, 4_2^+, 3_1^-$	—
6	—	$2_1^+, 0_2^+, 2_2^+, 4_2^+, 3_1^-$
7	$2_1^+, 3_1^-$	$2_1^+, 3_1^-$
8	$2_1^+, 0_2^+, 2_2^+, 4_2^+, 3_1^-$	$2_1^+, 0_2^+, 2_2^+, 4_2^+, 3_1^-$

Tabela 8.1: Combinações de estados inelásticos acoplados do projétil e alvo, usados na análise das figuras 8.1.3 e 8.1.4.

Uma observação dos resultados apresentados na figura 8.1.3, relativo ao espalhamento

Figura 8.1.1: Distribuições angulares de espalhamento elástico para o sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ em $E_{lab} = 40, 46, 50$ e 60 MeV. Os dados experimentais foram obtidos de [120, 121]. As linhas pretas contínuas correspondem aos resultados de cálculos CC usando o potencial alpha e acoplado os 10 canais inelásticos. As linhas azuis tracejadas representam os resultados com esse mesmo potencial, mas sem nenhum canal inelástico acoplado. As linhas vermelhas contínuas correspondem ao acoplamento de 10 canais, porém usando o potencial de São Paulo.

elástico, mostra que:

1. Os melhores resultados são obtidos quando a totalidade dos canais é acoplada (set 8), mas um melhor ajuste dos dados na região angular traseira demanda o acoplamento de outros canais não considerados no GRVM.
2. O acoplamento do tripleto do ^{16}O não tem efeito significativo (set 3 e 5 na figura 8.1.3

Figura 8.1.2: Distribuições angulares de espalhamento inelástico para o estado excitado 2_1^+ (1.454 MeV) do ^{58}Ni , obtidas para energias de laboratório de 37, 42, 50 e 60 MeV. Os dados experimentais foram obtidos em [122, 123, 121]. A notação de linhas e cores é a mesma da figura 8.1.1.

(b) estão superpostos).

3. O acoplamento do tripleto do ^{58}Ni também não tem efeito significativo (set 4 e 6 na figura 8.1.3 (c) estão superpostos).
4. Os estados 2_1^+ e 3_1^- do ^{16}O e do ^{58}Ni são significativos, sendo que a correspondente contribuição do ^{58}Ni é maior do que a do ^{16}O (compare set 1, 3 e 4 na figura 8.1.3 (b)).
5. Apesar de contribuir para o elástico, o efeito do estado 3_1^- do ^{16}O não é tão relevante

como reportado em [117] e comentado no capítulo anterior (compare set 1 e 2 na figura 8.1.3 (a)).

Figura 8.1.3: Seções de choque de espalhamento elástico do sistema $^{16}\text{O}+^{58}\text{Ni}$, para $E_{\text{lab}} = 46$ MeV, com dados experimentais tomados de [124]. Vide texto para mais detalhes.

No relativo ao processo inelástico dos estados 2_1^+ e 4_2^+ do ^{58}Ni na figura 8.1.4, os análises do resultados de cálculos CC mostram que:

1. Comparando os resultados obtidos com a totalidade dos acoplamentos (set 8) em relação àqueles obtidos no contexto DWBA (set 1), verificamos um efeito pequeno no que se refere ao estado 2_1^+ de ^{58}Ni , e um efeito muito significativo para o estado 4_2^+ . Isso era esperado, já que no caso vibracional puro (^{58}Ni) o acoplamento do 2_1^+ com o canal elástico é realizado em 1ª ordem, enquanto o 4_2^+ está acoplado diretamente ao elástico somente em 2ª ordem (existe, também, acoplamento em 1ª ordem entre o 2_1^+ e o 4_2^+).

2. Verifica-se uma grande diferença nas seções de choque do 4_2^+ , quando se acopla ou não o estado 2_1^+ do ^{58}Ni (compare set 1 e 4 na figura 8.1.4 (d)).
3. O acoplamento do tripleto do ^{58}Ni não tem muito efeito sobre as seções de choque do estado 4_2^+ (compare set 4 e 6 na figura 8.1.4 (d)).
4. O efeito dos acoplamentos dos estados do ^{16}O sobre os estados 2_1^+ e 4_2^+ do ^{58}Ni é muito pequeno (veja set 1,2,3 e 5 nas figuras 8.1.4 (a) e (c)).

Em geral, os resultados de cálculos CC completos (10 canais) e os dados experimentais do espalhamento inelástico, para $E_{lab} = 46$ MeV, não concordam satisfatoriamente (vide figura 8.1.4). Porém, se compararmos os ajustes do espalhamento inelástico do estado 2_1^+ do ^{58}Ni para $E_{lab} = 37, 42, 50$ e 60 MeV da figura 8.1.2, com os resultados para esse mesmo estado em $E_{lab} = 46$ da figura 8.1.4, podemos perceber que somente para 46 MeV os resultados teóricos são aproximadamente duas vezes menores que as seções de choque experimentais. Isso nos leva a não confiar plenamente nos dados experimentais de espalhamento inelástico da referência [124].

Finalmente, na figura 8.1.5 são apresentados os resultados dos cálculos CC para o processo de fusão, comparados com dados experimentais [125]. A linha contínua mostra os resultados teóricos quando usamos o potencial alpha acoplando os 10 canais inelásticos e a linha tracejada representa os resultados sem nenhum canal inelástico acoplado. O acordo entre os resultados teóricos e os dados experimentais melhora notavelmente quando acoplados todos os estados excitados considerados no modelo, sugerindo isso que os canais inelásticos têm uma importância sustancial na descrição do processo de fusão e deveriam ser levados em conta em cálculos CC. Nota-se, porém, que faltam acoplamentos para descrever os dados de maneira plenamente satisfatória.

Figura 8.1.4: Seções de choque de espalhamento inelástico dos estados 2_1^+ (1.45 MeV) e 4_2^+ (2.45 MeV) do ^{58}Ni , para $E_{\text{lab}} = 46$ MeV. Dados experimentais tomados de [124]. Vide texto para mais detalhes.

Figura 8.1.5: Função de excitação de fusão para o sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$. Os dados experimentais foram obtidos em [125]. A linha contínua mostra os resultados de cálculo CC, quando usamos o potencial alpha e acoplamos os 10 canais inelásticos. A linha tracejada representa os resultados obtidos sem nenhum canal inelástico acoplado.

Conclusões e perspectivas

Utilizamos o Modelo Generalizado de Rotação-Vibração (GRVM) para desenvolver totalmente o formalismo de canais acoplados, tendo sido feita a conexão entre os potenciais de acoplamento e as densidades de transição. Estas densidades foram, por sua vez, calculadas explicitamente e de maneira analítica, no contexto do GRVM, levando em consideração valores finitos para a difusividade e termos até segunda ordem na deformação nuclear.

Nossas análises de espalhamento elétron-núcleo mostraram que os resultados do GRVM fornecem uma boa descrição de dados experimentais, tais como: energias de excitação dos estados considerados no GRVM, probabilidades de transição reduzida, fatores de forma elástico e inelástico, assim como das correspondentes densidades de transição. Essas análises permitiram obter os valores dos parâmetros que descrevem a estrutura nuclear (e que são próprios do GRVM) para uma grande quantidade de núcleos, numa ampla região de massas, permitindo usar esses dados no cálculo de densidades de transição para análises CC. Para núcleos leves (^{12}C e ^{16}O), uma melhor descrição foi atingida quando se usaram somente termos de primeira ordem.

Análises de espalhamentos elástico, inelásticos e de fusão para o sistema $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$, com energias de bombardeio em torno da barreira de potencial, foram realizadas usando o programa *CCGRVM*. Essas análises mostraram a importância do acoplamento dos diversos canais inelásticos e o respectivo efeito nas seções de choque calculadas. Uma aceitável descrição dos resultados experimentais foi atingida, sendo que esses resultados constituem uma previsão teórica do modelo e não um mero ajuste de dados. Além disso, os resultados dos cálculos CC para $^{16}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ são, também, consistentes com os resultados de espalhamento de elétrons em ^{16}O e ^{58}Ni . Daí a importância deste trabalho e do modelo GRVM.

Os resultados obtidos nesta tese, e mesmo o programa CCGRVM, podem ser usados no futuro para realizar análises CC de vários sistemas de interesse. Novas análises de espalhamento elétron-núcleo poderiam ser realizadas no futuro, levando em conta o interesse que grandes laboratórios no mundo estão tendo em fazer esse tipo de experimentos. Possíveis aprimoramentos do modelo podem ser levados em consideração para tentar descrever mais fenômenos de maneira mais precisa.

Apêndice A

Densidades de transição reduzida

Nesta parte da tese será apresentada a forma como foram obtidas as expressões explícitas das densidades de transição reduzidas, para os diferentes auto-estados.

A.1 Cálculo das quantidades $\langle \phi | \alpha_{\lambda 0} | \phi' \rangle$ e $\langle \phi | \alpha_{\lambda' \mu}^* \alpha_{\lambda'' \mu}^* | \phi' \rangle$

Para calcular as densidades de transição reduzidas $\rho_{\lambda}^{I' n' \rightarrow I n}(r)$ da equação (3.1.10), devemos calcular primeiro, segundo a expansão em multipolos (3.2.3), dois termos (vide equações (3.2.4) e (3.2.5)):

$$\langle \phi_{n_2 I_2 n_3 I_3; I 0} | \alpha_{\lambda 0} | \phi_{n'_2 I'_2 n'_3 I'_3; I' 0} \rangle \quad (\text{A.1.1})$$

e

$$\left\langle \phi_{n_2 I_2 n_3 I_3; I 0} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n'_2 I'_2 n'_3 I'_3; I' 0} \right\rangle \quad (\text{A.1.2})$$

onde temos definido, para facilitar a escrita dos cálculos e resultados, e de maneira similar à feita em [126]:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{bmatrix} &= \int Y_{\lambda_1 \mu_1}(\Omega) Y_{\lambda_2 \mu_2}(\Omega) Y_{\lambda \mu}^*(\Omega) d\Omega \\ &= \sqrt{\frac{(2\lambda_1 + 1)(2\lambda_2 + 1)}{4\pi(2\lambda + 1)}} C_{\mu_1 \mu_2 \mu}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} C_{0 0 0}^{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \end{aligned} \quad (\text{A.1.3})$$

Como tínhamos mencionado anteriormente, nos cálculos CC vai ser assumido que não há excitação de quadrupolo e octupolo de maneira simultânea e que também não temos excitação mútua (dos dois núcleos de maneira simultânea). Então, os estados a serem considerados são somente aqueles mostrados na tabela 2.1. Nos cálculos temos usado as autofunções dadas por (1.1.19)-(1.1.22).

Para simplificar a notação, para as funções de onda usaremos os seguintes índices (vide tabela 2.1):

$$\begin{aligned}\phi_{n_2 I_2 n_3 I_3; n_I} &\longleftrightarrow \phi_{nI} \\ \phi_{n'_2 I'_2 n'_3 I'_3; n'I'} &\longleftrightarrow \phi_{n'I'}\end{aligned}\tag{A.1.4}$$

Também para facilitar a escrita, vamos definir as quantidades $D2$ e $D3$:

$$D2 = \frac{\int \partial^2 \rho(r) r^2 dr}{\int \partial \rho(r) r^2 dr}\tag{A.1.5}$$

$$D3 = \frac{\int \partial^2 \rho(r) r^3 dr}{\int \partial \rho(r) r^3 dr}\tag{A.1.6}$$

No que segue, apresentamos os resultados obtidos para (A.1.1) e (A.1.2), onde as integrais sobre os ângulos de Euler foram realizadas de forma analítica (o que era um dos objetivos do GRVM). As integrais em $d\tau_3$ são facilmente realizadas analiticamente com as autofunções 1.1.23. Sendo assim, resta fazer somente as integrais sobre $d\tau_2$, as quais devem ser feitas numericamente.

1. Ambos estados g.s.: $n = 0$, $I = 0$, $n' = 0$ e $I' = 0$.

$$\begin{aligned}\langle \phi_{00} | \alpha_{\lambda 0} | \phi_{00} \rangle &= \langle \phi_{00} | \alpha_{\lambda 0} | \phi_{00} \rangle \delta_{\lambda 0} \\ &= -\frac{1}{4\sqrt{\pi}} \left[b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 |\chi_{000}^{(2)}|^2 d\tau_2 + b_3^2 \int \tilde{\beta}_3^2 |\chi_{00}^{(3)}|^2 d\tau_3 \right] \times D2\end{aligned}\tag{A.1.7}$$

E para o produto $\alpha \times \alpha$

$$\begin{aligned}
& \langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{00} \rangle \\
&= \langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{00} \rangle \delta_{\lambda 0} \delta_{\lambda' \lambda''} \delta_{\mu' - \mu''} \\
&= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \left[b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 |\chi_{000}^{(2)}|^2 d\tau_2 + b_3^2 \int \tilde{\beta}_3^2 |\chi_{00}^{(3)}|^2 d\tau_3 \right]
\end{aligned} \tag{A.1.8}$$

2. Estado g.s e o outro estado excitado: $n = 0$, $I = 0$, $n' \neq 0$ e I' .

$$\langle \phi_{00} | \alpha_{\lambda 0} | \phi_{n' I'} \rangle = \langle \phi_{00} | \alpha_{\lambda 0} | \phi_{n' I'} \rangle \delta_{\lambda I'} \tag{A.1.9}$$

Fazendo o cálculo para cada caso temos que:

a. Com $n' = 2$ e $I' = 0$.

$$\langle \phi_{00} | \alpha_{00} | \phi_{20} \rangle = -\frac{D2}{4\sqrt{\pi}} \left[b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} \chi_{200}^{(2)} d\tau_2 + b_3^2 \int \tilde{\beta}_3^2 |\chi_{00}^{(3)}|^2 d\tau_3 \right] \tag{A.1.10}$$

b. Com $n' = 1$ ou 2 , $I' = 2$.

$$\langle \phi_{00} | \alpha_{20} | \phi_{n' 2} \rangle = \frac{b_2}{\sqrt{5}} \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{n' 20}^{(2)} \cos \gamma + \sqrt{2} \chi_{n' 22}^{(2)} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \tag{A.1.11}$$

c. Com $n' = 1$ e $I' = 3$.

$$\langle \phi_{00} | \alpha_{30} | \phi_{13} \rangle = \frac{b_3}{\sqrt{7}} \int \tilde{\beta}_3 \chi_{00}^{(3)} \chi_{13}^{(3)} d\tau_3 \tag{A.1.12}$$

No mesmo caso onde a transição é desde o *g.s.* a um estado excitado, achamos os valores para o produto $\alpha^* \times \alpha^*$:

$$\begin{aligned}
& \left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n' I'} \right\rangle \\
&= \left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n' I'} \right\rangle \delta_{\lambda I'} \delta_{\lambda' \lambda''} \delta_{\lambda' \nu} \delta_{\mu' - \mu''}
\end{aligned} \tag{A.1.13}$$

onde ν indica o modo excitado: $\nu = 2$ para o modo de quadrupolo e $\nu = 3$ para o modo de octupolo.

Para $\nu = 2$ temos:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n' I'} \right\rangle \\ &= \frac{5}{2\sqrt{\pi}(2I'+1)} C_{000}^{2 \ 2 \ I'} \sum_{z'=-2}^2 \sum_{z''=-2}^2 \sum_{k_2=0}^{I'} \left[\int \chi_{000}^{(2)} a_{2z'} a_{2z''} \chi_{n' I' k_2}^{(2)} d\tau_2 \left(C_{z' z'' k_2}^{2 \ 2 \ I'} + C_{z' z'' -k_2}^{2 \ 2 \ I'} \right) \left(1 - \frac{\delta_{k_2 0}}{2} \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.1.14})$$

Neste caso ($\nu = 2$) podemos ter três possibilidades: $I' = 0$, $I' = 2$ ou $I' = 4$.

d. Com $I' = 0$ temos $n' = 2$ e:

$$\left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{20} \right\rangle = \frac{b_2^2}{2\sqrt{\pi}} \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} \chi_{200}^{(2)} d\tau_2 \right] \quad (\text{A.1.15})$$

e. Com $I' = 2$ temos $n' = 1$ ou 2 e:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n' 2} \right\rangle \\ &= \frac{b_2^2}{7\sqrt{\pi}} \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma \chi_{000}^{(2)} \chi_{n' 20}^{(2)} d\tau_2 - \sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{000}^{(2)} \chi_{n' 22}^{(2)} d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.1.16})$$

f. Com $I' = 4$ temos $n' = 2$ e:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{24} \right\rangle \\ &= \frac{b_2^2}{42\sqrt{\pi}} \left[\int \tilde{\beta}_2^2 (6 \cos^2 \gamma + \sin^2 \gamma) \chi_{000}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 + \sqrt{30} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{000}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \quad \left. + \sqrt{70} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin^2 \gamma \chi_{000}^{(2)} \chi_{244}^{(2)} d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.1.17})$$

Para $\nu = 3$ temos:

g. Explicitamente: $n' = 1, I' = 3$.

$$\begin{aligned}
& \left\langle \phi_{00} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{13} \right\rangle \\
&= \frac{7}{2\sqrt{\pi}(2*3+1)} (C_{00}^3 \begin{smallmatrix} 3 & 3 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix})^2 \left[b_3^2 \int \tilde{\beta}_3^2 \chi_{00}^{(3)} \chi_{13}^{(3)} d\tau_3 \right] \\
&= 0
\end{aligned} \tag{A.1.18}$$

3. Ambos estados excitados: $n, I; n', I'$.

Comecemos calculando:

$$\langle \phi_{nI} | \alpha_{\lambda 0} | \phi_{n'I'} \rangle \tag{A.1.19}$$

a. Para $\lambda = 0$ temos:

$$\langle \phi_{nI} | \alpha_{00} | \phi_{n'I'} \rangle = \langle \phi_{nI} | \alpha_{00} | \phi_{n'I'} \rangle \delta_{nn'} \delta_{II'} \tag{A.1.20}$$

daqui

$$\langle \phi_{nI} | \alpha_{00} | \phi_{nI} \rangle = -\frac{D2}{4\sqrt{\pi}} \left[\langle \phi_{n\nu I_\nu}^{(\nu)} | \beta_\nu^2 | \phi_{n'_\nu I'_\nu}^{(\nu)} \rangle + \langle \phi_{00}^{(\tilde{\nu})} | \beta_{\tilde{\nu}}^2 | \phi_{00}^{(\tilde{\nu})} \rangle \right] \delta_{n\nu n'_\nu} \delta_{I_\nu I'_\nu} \tag{A.1.21}$$

a.1) No caso de $\nu = 2$ e $\tilde{\nu} = 3$ vamos ter:

$$\langle \phi_{00}^{(3)} | \beta_3^2 | \phi_{00}^{(3)} \rangle = b_3^2 \int \tilde{\beta}_3^2 |\chi_{00}^{(3)}|^2 d\tau_3 \tag{A.1.22}$$

$$\begin{aligned}
\langle \phi_{n_2 I_2}^{(2)} | \beta_2^2 | \phi_{n'_2 I'_2}^{(2)} \rangle &= \sum_{k'_2=0}^{I'_2} \sum_{k_2=0}^{I_2} \left[b_2^2 \int \chi_{n'_2 I'_2 k'_2}^{(2)} \tilde{\beta}_2^2 \chi_{n_2 I_2 k_2}^{(2)} d\tau_2 \left(1 - \frac{\delta_{k'_2 0}}{2} \right) \left(1 - \frac{\delta_{k_2 0}}{2} \right) \right. \\
&\quad \left. \times 2 \delta_{k'_2 k_2} \delta_{k'_2 - k_2} \right] \delta_{n_2 n'_2} \delta_{I_2 I'_2}
\end{aligned} \tag{A.1.23}$$

a.2) No caso de $\nu = 3$ e $\tilde{\nu} = 2$:

$$\langle \phi_{00}^{(2)} | \beta_2^2 | \phi_{00}^{(2)} \rangle = b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 |\chi_{000}^{(2)}|^2 d\tau_2 \tag{A.1.24}$$

$$\langle \phi_{n_3 I_3}^{(3)} | \beta_3^2 | \phi_{n_3 I_3}^{(3)} \rangle = b_3^2 \int \tilde{\beta}_3^2 |\chi_{n_3 I_3}^{(3)}|^2 d\tau_3 \quad (\text{A.1.25})$$

b. Para $\lambda = 1$ temos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{nI} | \alpha_{10} | \phi_{n'I'} \rangle &= \langle \phi_{n_\nu I_\nu} | \alpha_{10} | \phi_{n'_\nu I'_\nu} \rangle \delta_{\nu'\tilde{\nu}} \\ &= -\frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{35\pi}} D3 \langle \phi_{n_\nu I_\nu} | \alpha_{20} \alpha_{30} | \phi_{n'_\nu I'_\nu} \rangle \delta_{\nu' I'_\nu} \delta_{\nu I_\nu} \delta_{\nu' \tilde{\nu}} \\ &= -\frac{3}{2} \sqrt{\frac{3}{35\pi}} D3 \langle \phi_{n_\nu I_\nu}^{(\nu)} | \alpha_{\nu 0} | \phi_{00}^{(\nu)} \rangle \langle \phi_{00}^{(\tilde{\nu})} | \alpha_{\tilde{\nu} 0} | \phi_{n_{\tilde{\nu}} I_{\tilde{\nu}}}^{(\tilde{\nu})} \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1.26})$$

sendo que ν e $\tilde{\nu}$ tomam valores: $\nu = 2, \tilde{\nu} = 3$; ou vice-versa. O que quer dizer que esse produto é diferente de zero somente entre estados de quadrupolo e octupolo.

c. Para $\lambda = 2$ temos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{nI} | \alpha_{20} | \phi_{n'I'} \rangle &= \langle \phi_{n_\nu I_\nu} | \alpha_{20} | \phi_{n'_\nu I'_\nu} \rangle \delta_{\nu'\nu} \delta_{\nu 2} \\ &= \frac{\sqrt{(2I_2+1)(2I'_2+1)}}{5} C_{0 \ 0 \ 0}^{I_2 \ I'_2 \ 2} \sum_{k_2=0}^{I_2} \sum_{k'_2=0}^{I'_2} \sum_{\mu=-2}^2 \left[\int \chi_{n_2 I_2 k_2}^{(2)} a_{2\mu} \chi_{n'_2 I'_2 k'_2}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ &\quad \times \left(1 - \frac{\delta_{k_2 0}}{2} \right) \left(1 - \frac{\delta_{k'_2 0}}{2} \right) \left(C_{k_2 \ k'_2 \ \mu}^{I_2 \ I'_2 \ 2} + C_{-k_2 \ -k'_2 \ \mu}^{I_2 \ I'_2 \ 2} + C_{-k_2 \ k'_2 \ \mu}^{I_2 \ I'_2 \ 2} + C_{k_2 \ -k'_2 \ \mu}^{I_2 \ I'_2 \ 2} \right) \Big] \end{aligned} \quad (\text{A.1.27})$$

d. Para $\lambda = 3$ temos:

$$\begin{aligned} \langle \phi_{nI} | \alpha_{30} | \phi_{n'I'} \rangle &= \langle \phi_{n_\nu I_\nu} | \alpha_{30} | \phi_{n'_\nu I'_\nu} \rangle \delta_{\nu'\nu} \delta_{\nu 3} \\ &= \frac{\sqrt{(2I_3+1)(2I'_3+1)}}{7} (C_{0 \ 0 \ 0}^{I_3 \ I'_3 \ 3})^2 \int \chi_{n_3 I_3}^{(3)} a_{30} \chi_{n'_3 I'_3}^{(3)} d\tau_3 \\ &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.1.28})$$

Para o caso que estamos tratando, no qual ambos estados do produto são excitados, vamos fazer agora os cálculos para o produto $\alpha^* \times \alpha^*$:

$$\begin{aligned} &\left\langle \phi_{nI} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n'I'} \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n'_\nu I'_\nu} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1.29})$$

Aqui podemos ter várias situações.

e. Vamos considerar primeiro a situação na qual $\nu \neq \nu'$, com isso tendo que $\nu' = \tilde{\nu}$. Então,

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n_{\nu'} I_{\nu'}} \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n_{\tilde{\nu}} I_{\tilde{\nu}}} \right\rangle \delta_{\lambda' \tilde{\lambda}''} \delta_{\mu' - \mu''} \end{aligned} \quad (\text{A.1.30})$$

sem perda de generalidade vamos fazer $\lambda' = \tilde{\nu}$ e $\lambda'' = \nu$ (com $\nu = 2$, $\tilde{\nu} = 3$; ou vice-versa). Daqui obtemos que:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\nu \mu'} \begin{bmatrix} \tilde{\nu} & \nu & \lambda \\ \mu' & -\mu' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\tilde{\nu} \mu'}^* \alpha_{\nu - \mu'}^* \right| \phi_{n_{\tilde{\nu}} I_{\tilde{\nu}}} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{35}{(2\lambda + 1)\pi}} (C_{0 \ 0 \ 0}^{\tilde{\nu} \ \nu \ \lambda})^2 \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu}^{(\nu)} \right| \alpha_{\nu 0} \left| \phi_{00}^{(\nu)} \right\rangle \left\langle \phi_{00}^{(\tilde{\nu})} \right| \alpha_{\tilde{\nu} 0} \left| \phi_{n_{\tilde{\nu}} I_{\tilde{\nu}}}^{(\tilde{\nu})} \right\rangle \delta_{2I_2} \delta_{3I_3}, \end{aligned} \quad (\text{A.1.31})$$

com $1 \leq \lambda \leq 5$ impar para evitar que se anule o Clebsch-Gordan. Os resultados para as expressões finais na equação anterior já são conhecidos da seção onde somente considerávamos um estado excitado.

e. Vamos agora a considerar a situação quando $\nu' = \nu$ na equação (A.1.29):

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n_{\nu'} I_{\nu'}} \right\rangle \\ &= \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\lambda' \mu'} \sum_{\lambda'' \mu''} \begin{bmatrix} \lambda' & \lambda'' & \lambda \\ \mu' & \mu'' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\lambda' \mu'}^* \alpha_{\lambda'' \mu''}^* \right| \phi_{n_{\nu} I_{\nu}} \right\rangle \delta_{\lambda' \lambda''} \delta_{\mu' - \mu''}. \end{aligned} \quad (\text{A.1.32})$$

Dentro das opções possíveis da somatória vamos ter que $\lambda' = \nu$ ou $\lambda' \neq \nu$.

e.1) No caso onde $\lambda' \neq \nu$ - ou seja, $\lambda' = \tilde{\nu}$ vamos ter:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\mu'} \begin{bmatrix} \tilde{\nu} & \tilde{\nu} & \lambda \\ \mu' & -\mu' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\tilde{\nu} \mu'}^* \alpha_{\tilde{\nu} - \mu'}^* \right| \phi_{n_{\nu'} I_{\nu'}} \right\rangle \delta_{n_{\nu'} n_\nu} \delta_{I_{\nu'} I_\nu} \delta_{\lambda 0} \\ &= \left\langle \phi_{00}^{(\tilde{\nu})} \left| \sum_{\mu'} \begin{bmatrix} \tilde{\nu} & \tilde{\nu} & 0 \\ \mu' & -\mu' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\tilde{\nu} \mu'}^* \alpha_{\tilde{\nu} - \mu'}^* \right| \phi_{00}^{(\tilde{\nu})} \right\rangle \end{aligned} \quad (\text{A.1.33})$$

e.2) No caso onde $\lambda' = \nu$ vamos ter:

$$\left\langle \phi_{n_\nu I_\nu} \left| \sum_{\mu'} \begin{bmatrix} \nu & \nu & \lambda \\ \mu' & -\mu' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{\nu\mu'}^* \alpha_{\nu-\mu'}^* \right| \phi_{n'_\nu I'_\nu} \right\rangle \quad (\text{A.1.34})$$

-Para $\nu = 2$ (funções de quadrupolo) vamos ter:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{n_2 I_2} \left| \sum_{\mu'} \begin{bmatrix} 2 & 2 & \lambda \\ \mu' & -\mu' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{2\mu'}^* \alpha_{2-\mu'}^* \right| \phi_{n'_2 I'_2} \right\rangle \\ &= \frac{5}{2\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{(2I_2+1)(2I'_2+1)}}{(2\lambda+1)^{3/2}} \begin{pmatrix} C_{0 \ 0 \ 0}^{2 \ 2 \ \lambda} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{0 \ 0 \ 0}^{I_2 \ I'_2 \ \lambda} \end{pmatrix} \\ & \times \sum_{k_2=0}^{I_2} \sum_{k'_2=0}^{I'_2} \sum_{z'=-2}^2 \sum_{z''=-2}^2 \int \chi_{n_2 I_2 k_2}^{(2)} a_{2z'} a_{2z''} \chi_{n'_2 I'_2 k'_2}^{(2)} d\tau_2 \left(1 - \frac{\delta_{k_2 0}}{2}\right) \left(1 - \frac{\delta_{k'_2 0}}{2}\right) \\ & \times \sum_{p=-\lambda}^{\lambda} C_{z' \ z'' \ p}^{2 \ 2 \ \lambda} \left(C_{k_2 \ k'_2 \ -p}^{I_2 \ I'_2 \ \lambda} + C_{-k_2 \ -k'_2 \ -p}^{I_2 \ I'_2 \ \lambda} + C_{-k_2 \ k'_2 \ -p}^{I_2 \ I'_2 \ \lambda} + C_{k_2 \ -k'_2 \ -p}^{I_2 \ I'_2 \ \lambda} \right) \end{aligned} \quad (\text{A.1.35})$$

com $0 \leq \lambda \leq 4$ par para evitar que se anule o Clebsch-Gordan.

Lembrando que:

$$\begin{aligned} n_2 = 1, I_2^\pi &= 2^+ \\ n_2 = 2, I_2^\pi &= 0^+, 2^+ \text{ ou } 4^+ \end{aligned} \quad (\text{A.1.36})$$

-Para $\nu = 3$ (funções de octupolo) vamos ter:

$$\begin{aligned} & \left\langle \phi_{13} \left| \sum_{\mu'} \begin{bmatrix} 3 & 3 & \lambda \\ \mu' & -\mu' & 0 \end{bmatrix} \alpha_{3\mu'}^* \alpha_{3-\mu'}^* \right| \phi_{13} \right\rangle \\ &= \frac{7}{2\sqrt{\pi}} \frac{\sqrt{(2*3+1)(2*3+1)}}{(2\lambda+1)^{3/2}} \left(C_{0 \ 0 \ 0}^{3 \ 3 \ \lambda} \right)^4 \int (a_{30})^2 |\chi_{13}^{(3)}|^2 d\tau_3 \end{aligned} \quad (\text{A.1.37})$$

com $0 \leq \lambda \leq 6$ par para evitar que se anule o Clebsch-Gordan.

A.2 Formas explícitas das densidades de transição reduzida

Nesta seção, daremos expressões explícitas para as densidades de transição para os estados apresentados na tabela 2.1, usando as autofunções dadas por (1.1.19)-(1.1.22). Nos resultados apresentados abaixo, as integrais relacionadas aos ângulos de Euler já foram calculadas

analiticamente e, portanto, somente a integração numérica sobre $d\tau_2$ precisam ser realizadas numericamente, com o fim de obter as densidades.

Como mencionado no capítulo 4, a notação aqui usada, $\rho_{\lambda}^{I'_{n'} \rightarrow I_n}(r)$, vai indicar a transição entre o estado $I'_{n'}$ inicial e o estado I_n final, e leva em conta os estados considerados no GRVM segundo a tabela 2.1.

As densidades de transição são definidas por:

$$\rho_{\lambda}^{I'_{n'} \rightarrow I_n}(r) = \frac{\langle \phi_{nI} | \rho_{\lambda 0}(r) | \phi_{n'I'} \rangle}{C_{0 \ 0 \ 0}^{I' \ \lambda \ I}} \quad (\text{A.2.1})$$

onde $\rho_{\lambda 0}(r)$ foi definida em (3.2.3). Segundo as regras de seleção dos Clebsch-Gordan, os valores que λ pode tomar são: 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6; enquanto I e I' podem tomar os valores: 0, 2, 4, 3. Também deve se cumprir que $|I - I'| \leq \lambda \leq I + I'$ e $\lambda + I + I' = \text{par}$.

Para evitar calcular a metade das densidades de transição, vamos usar a propriedade de simetria:

$$\rho_{\lambda}^{I_n \rightarrow I'_{n'}} = (-1)^{\lambda} \sqrt{\frac{(2I+1)}{(2I'+1)}} \rho_{\lambda}^{I'_{n'} \rightarrow I_n} \quad (\text{A.2.2})$$

Então, levando em consideração as equações (A.1.7)-(A.1.37), termos diferentes de zero são somente os seguintes:

$$\begin{aligned} & \rho_0^{g.s. \rightarrow g.s.}, \rho_0^{g.s. \rightarrow 0_2}, \rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1}, \rho_2^{g.s. \rightarrow 2_2}, \rho_4^{g.s. \rightarrow 4_2}, \rho_3^{g.s. \rightarrow 3_1}, \rho_0^{0_2 \rightarrow 0_2}, \rho_2^{0_2 \rightarrow 2_1}, \rho_2^{0_2 \rightarrow 2_2}, \rho_4^{0_2 \rightarrow 4_2}, \rho_0^{2_1 \rightarrow 2_1}, \\ & \rho_0^{2_1 \rightarrow 2_2}, \rho_1^{2_1 \rightarrow 3_1}, \rho_2^{2_1 \rightarrow 2_1}, \rho_2^{2_1 \rightarrow 2_2}, \rho_2^{2_1 \rightarrow 4_2}, \rho_3^{2_1 \rightarrow 3_1}, \rho_4^{2_1 \rightarrow 2_1}, \rho_4^{2_1 \rightarrow 2_2}, \rho_4^{2_1 \rightarrow 4_2}, \rho_5^{2_1 \rightarrow 3_1}, \rho_0^{2_2 \rightarrow 2_2}, \rho_1^{2_2 \rightarrow 3_1}, \\ & \rho_2^{2_2 \rightarrow 2_2}, \rho_2^{2_2 \rightarrow 4_2}, \rho_3^{2_2 \rightarrow 3_1}, \rho_4^{2_2 \rightarrow 2_2}, \rho_4^{2_2 \rightarrow 4_2}, \rho_5^{2_2 \rightarrow 3_1}, \rho_0^{4_2 \rightarrow 4_2}, \rho_2^{4_2 \rightarrow 4_2}, \rho_4^{4_2 \rightarrow 4_2}, \rho_0^{3_1 \rightarrow 3_1}, \rho_2^{3_1 \rightarrow 3_1}, \rho_4^{3_1 \rightarrow 3_1}, \\ & \rho_6^{3_1 \rightarrow 3_1}. \end{aligned}$$

Esses casos podem ser agrupados segundo alguns critérios, como segue.

A.2.1 Densidades diagonais.

As densidades de transição diagonais correspondem àquelas para as quais $nI = n'I'$.

a. A densidade de carga para o $g.s.$ é dado na equação (4.1.5):

$$\rho_{0 \text{ (elast)}}^{g.s. \rightarrow g.s.}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{\langle \beta_2^2 \rangle + 3b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.2.3})$$

onde:

$$\langle \beta_\lambda^2 \rangle \equiv \langle \phi_{g.s.} | \beta_\lambda^2 | \phi_{g.s.} \rangle = b_\lambda^2 \int |\chi_{g.s.}^{(\lambda)}|^2 \tilde{\beta}_\lambda^2 d\tau_\lambda. \quad (\text{A.2.4})$$

e $D2$ definida em (A.1.5).

b. A expressão da densidade diagonal do estado 0_2^+ é similar à do $g.s.$, e, já que é esfericamente simétrica, somente tem a componente $\lambda = 0$:

$$\rho_0^{0_2 \rightarrow 0_2}(r) = \sqrt{4\pi} \left\{ \rho_{nd}(r) + \frac{1}{8\pi} [\partial^2 \rho(r) - D2 \partial \rho(r)] \times \left[b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 |\chi_{200}^{(2)}|^2 d\tau_2 + 3b_3^2 \right] \right\} \quad (\text{A.2.5})$$

c. Os estados 2_1^+ ($n_2 = 1$) e 2_2^+ ($n_2 = 2$) têm as componentes $\lambda = 0, 2$ e 4 . Expressões similares são encontradas em ambos casos, nas quais a diferença é somente na função de onda do quadrupolo:

$$\rho_0^{2_{n_2} \rightarrow 2_{n_2}}(r) = \sqrt{4\pi} \left\{ \rho_{nd}(r) + \frac{1}{8\pi} [\partial^2 \rho(r) - D2 \partial \rho(r)] \times \left[b_2^2 \left(\int \tilde{\beta}_2^2 |\chi_{n_2 20}^{(2)}|^2 d\tau_2 + 2 \int \tilde{\beta}_2^2 |\chi_{n_2 22}^{(2)}|^2 d\tau_2 \right) + 3b_3^2 \right] \right\} \quad (\text{A.2.6})$$

$$\begin{aligned} \rho_2^{2_{n_2} \rightarrow 2_{n_2}}(r) = & -\sqrt{\frac{2}{7}} b_2 \partial \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \cos \gamma |\chi_{n_2 20}^{(2)}|^2 d\tau_2 - 2\sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2 \sin \gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{n_2 22}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \left. - 2 \int \tilde{\beta}_2 \cos \gamma |\chi_{n_2 22}^{(2)}|^2 d\tau_2 \right] - \frac{b_2^2}{14} \sqrt{\frac{10}{7\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma |\chi_{n_2 20}^{(2)}|^2 d\tau_2 \right. \\ & \left. + 2\sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{n_2 22}^{(2)} d\tau_2 - 2 \int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma |\chi_{n_2 22}^{(2)}|^2 d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.7})$$

$$\begin{aligned} \rho_4^{2_{n_2} \rightarrow 2_{n_2}}(r) = & \frac{3b_2^2}{7\sqrt{14\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \left(\cos^2 \gamma + \frac{1}{6} \sin^2 \gamma \right) |\chi_{n_2 20}^{(2)}|^2 d\tau_2 \right. \\ & \left. + \frac{5\sqrt{2}}{6} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{n_2 22}^{(2)} d\tau_2 + \frac{1}{3} \int \tilde{\beta}_2^2 (\cos^2 \gamma + 6 \sin^2 \gamma) |\chi_{n_2 22}^{(2)}|^2 d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.8})$$

d. O estado 4_2^+ tem componentes $\lambda = 0, 2$ e 4 :

$$\rho_0^{4_2 \rightarrow 4_2}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{1}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D2 \partial \rho(r)] \times \left[b_2^2 \int \tilde{\beta}_2^2 \left(|\chi_{240}^{(2)}|^2 + 2|\chi_{242}^{(2)}|^2 + 2|\chi_{244}^{(2)}|^2 \right) d\tau_2 + 3b_3^2 \right] \quad (\text{A.2.9})$$

$$\begin{aligned}
\rho_2^{4_2 \rightarrow 4_2}(r) = & -2\sqrt{\frac{5}{77}}b_2\partial\rho(r)\left[\int\tilde{\beta}_2\cos\gamma|\chi_{240}^{(2)}|^2d\tau_2-3\sqrt{\frac{6}{5}}\int\tilde{\beta}_2\sin\gamma\chi_{240}^{(2)}\chi_{242}^{(2)}d\tau_2\right. \\
& +\frac{4}{5}\int\tilde{\beta}_2\cos\gamma|\chi_{242}^{(2)}|^2d\tau_2-\frac{6}{5}\sqrt{\frac{7}{3}}\int\tilde{\beta}_2\sin\gamma\chi_{242}^{(2)}\chi_{244}^{(2)}d\tau_2-\frac{14}{5}\int\tilde{\beta}_2\cos\gamma|\chi_{244}^{(2)}|^2d\tau_2\left. \right] \\
& -\frac{5b_2^2}{7\sqrt{77}\pi}\partial^2\rho(r)\left[\int\tilde{\beta}_2^2\cos 2\gamma|\chi_{240}^{(2)}|^2d\tau_2+3\sqrt{\frac{6}{5}}\int\tilde{\beta}_2^2\sin 2\gamma\chi_{240}^{(2)}\chi_{242}^{(2)}d\tau_2\right. \\
& +\frac{4}{5}\int\tilde{\beta}_2^2\cos 2\gamma|\chi_{242}^{(2)}|^2d\tau_2+\frac{6}{5}\sqrt{\frac{7}{3}}\int\tilde{\beta}_2^2\sin 2\gamma\chi_{242}^{(2)}\chi_{244}^{(2)}d\tau_2-\frac{14}{5}\int\tilde{\beta}_2^2\cos 2\gamma|\chi_{244}^{(2)}|^2d\tau_2\left. \right]
\end{aligned} \tag{A.2.10}$$

$$\begin{aligned}
\rho_4^{4_2 \rightarrow 4_2}(r) = & \frac{27b_2^2}{7\sqrt{2002}\pi}\partial^2\rho(r)\left[\int\tilde{\beta}_2^2\left(\cos^2\gamma+\frac{1}{6}\sin^2\gamma\right)|\chi_{240}^{(2)}|^2d\tau_2-\frac{11\sqrt{30}}{54}\int\tilde{\beta}_2^2\sin 2\gamma\chi_{240}^{(2)}\chi_{242}^{(2)}d\tau_2\right. \\
& +\frac{7\sqrt{70}}{27}\int\tilde{\beta}_2^2\sin^2\gamma\chi_{240}^{(2)}\chi_{244}^{(2)}d\tau_2-\int\tilde{\beta}_2^2\left(\frac{11}{9}\cos^2\gamma-\frac{47}{27}\sin^2\gamma\right)|\chi_{242}^{(2)}|^2d\tau_2 \\
& +\frac{5\sqrt{21}}{9}\int\tilde{\beta}_2^2\sin 2\gamma\chi_{242}^{(2)}\chi_{244}^{(2)}d\tau_2+\frac{14}{9}\int\tilde{\beta}_2^2\left(\cos^2\gamma+\frac{1}{6}\sin^2\gamma\right)|\chi_{244}^{(2)}|^2d\tau_2\left. \right]
\end{aligned} \tag{A.2.11}$$

e. O estado 3_1^- tem componentes $\lambda = 0, 2, 4$ e 6 :

$$\rho_0^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = 2\sqrt{\pi}\rho_{nd}(r) + \frac{1}{4\sqrt{\pi}}\left[\partial^2\rho(r) - D2\partial\rho(r)\right]\left[b_2^2\int\tilde{\beta}_2^2|\chi_{000}^{(2)}|^2d\tau_2 + 5b_3^2\right] \tag{A.2.12}$$

$$\rho_2^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = -\frac{2b_3^2}{3\sqrt{3}\pi}\partial^2\rho(r) \tag{A.2.13}$$

$$\rho_4^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = \frac{15b_3^2}{11\sqrt{22}\pi}\partial^2\rho(r) \tag{A.2.14}$$

$$\rho_6^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = -\frac{1250b_3^2}{429\sqrt{33}\pi}\partial^2\rho(r) \tag{A.2.15}$$

A.2.2 Densidades de transição para excitações desde o g.s.

Relacionados às transições desde o *g.s.* a estados de spin I_n , temos que o valor das componentes é limitado a $\lambda = I$.

a. Para o estado 0_2^+ temos:

$$\rho_0^{g.s. \rightarrow 0_2}(r) = \frac{b_2^2}{4\sqrt{\pi}} \left[\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r) \right] \int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} \chi_{200}^{(2)} d\tau_2 \quad (\text{A.2.16})$$

b. Para o estado 2_1^+ ($n_2 = 1$) e 2_2^+ ($n_2 = 2$) temos:

$$\begin{aligned} \rho_2^{g.s. \rightarrow 2_{n_2}}(r) = & \frac{b_2}{\sqrt{5}} \partial \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos \gamma + \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \\ & + \frac{b_2^2}{14\sqrt{\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos 2\gamma - \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin 2\gamma \right) d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.17})$$

c. Para o estado 4_2^+ temos:

$$\begin{aligned} \rho_4^{g.s. \rightarrow 4_2}(r) = & \frac{b_2^2}{14\sqrt{\pi}} \partial^2 \rho(r) \left\{ \int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{000}^{(2)} \left[\chi_{240}^{(2)} \left(\cos^2 \gamma + \frac{1}{6} \sin^2 \gamma \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sqrt{\frac{5}{6}} \chi_{242}^{(2)} \sin 2\gamma + \frac{\sqrt{70}}{6} \chi_{244}^{(2)} \sin^2 \gamma \right] d\tau_2 \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.2.18})$$

d. Para o estado 3_1^+ temos:

$$\rho_3^{g.s. \rightarrow 3_1}(r) = b_3 \sqrt{\frac{3}{7}} \partial \rho(r) \quad (\text{A.2.19})$$

A.2.3 Densidades de transição entre estados excitados de quadrupolo.

$$\begin{aligned} \rho_2^{0_2 \rightarrow 2_{n_2}}(r) = & \frac{b_2}{\sqrt{5}} \partial \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{200}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos \gamma + \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \\ & + \frac{b_2^2}{14\sqrt{\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{200}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos 2\gamma - \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin 2\gamma \right) d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.20})$$

onde $n_2 = 1$ ou $n_2 = 2$.

$$\begin{aligned} \rho_4^{0_2 \rightarrow 4_2}(r) = & \frac{b_2^2}{14\sqrt{\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{200}^{(2)} \left[\chi_{240}^{(2)} \left(\cos^2 \gamma + \frac{1}{6} \sin^2 \gamma \right) + \sqrt{\frac{5}{6}} \chi_{242}^{(2)} \sin 2\gamma \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{\sqrt{70}}{6} \chi_{244}^{(2)} \sin^2 \gamma \right] d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.21})$$

$$\rho_0^{2_1 \rightarrow 2_2}(r) = \frac{b_2^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \left(\int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{120}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 + 2 \int \tilde{\beta}_2^2 \chi_{122}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right) \quad (\text{A.2.22})$$

$$\begin{aligned} \rho_2^{2_1 \rightarrow 2_2}(r) = & -\sqrt{\frac{2}{7}} b_2 \partial \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \cos \gamma \chi_{120}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 - \sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2 \sin \gamma \chi_{120}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \left. - \sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2 \sin \gamma \chi_{122}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 - 2 \int \tilde{\beta}_2 \cos \gamma \chi_{122}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right] \\ & - \frac{b_2^2}{14} \sqrt{\frac{10}{7\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma \chi_{120}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 + \sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{120}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \left. + \sqrt{2} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{122}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 - 2 \int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma \chi_{122}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.23})$$

$$\begin{aligned} \rho_4^{2_1 \rightarrow 2_2}(r) = & \frac{3b_2^2}{7\sqrt{14\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \left(\cos^2 \gamma + \frac{1}{6} \sin^2 \gamma \right) \chi_{120}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 + \frac{5\sqrt{2}}{12} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{120}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \left. + \frac{5\sqrt{2}}{12} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{122}^{(2)} \chi_{220}^{(2)} d\tau_2 + \frac{1}{3} \int \tilde{\beta}_2^2 (\cos^2 \gamma + 6 \sin^2 \gamma) \chi_{122}^{(2)} \chi_{222}^{(2)} d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.24})$$

$$\begin{aligned} \rho_2^{2_{n_2} \rightarrow 4_2}(r) = & \sqrt{\frac{2}{7}} b_2 \partial \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \cos \gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 + \sqrt{\frac{5}{6}} \int \tilde{\beta}_2 \sin \gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \left. + \frac{1}{3\sqrt{2}} \int \tilde{\beta}_2 \sin \gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 + \sqrt{\frac{5}{3}} \int \tilde{\beta}_2 \cos \gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 + \frac{\sqrt{35}}{3} \int \tilde{\beta}_2 \sin \gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{244}^{(2)} d\tau_2 \right] \\ & + \frac{b_2^2}{49} \sqrt{\frac{35}{2\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 - \sqrt{\frac{5}{6}} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & \left. - \frac{1}{3\sqrt{2}} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 + \sqrt{\frac{5}{3}} \int \tilde{\beta}_2^2 \cos 2\gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 - \frac{\sqrt{35}}{3} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{244}^{(2)} d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.25})$$

onde $n_2 = 1$ ou $n_2 = 2$.

$$\begin{aligned} \rho_4^{2_{n_2} \rightarrow 4_2}(r) = & -\frac{5b_2^2}{7\sqrt{77\pi}} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2^2 \left(\cos^2 \gamma + \frac{1}{6} \sin^2 \gamma \right) \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 + \sqrt{\frac{2}{15}} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 \right. \\ & - \frac{7}{3} \sqrt{\frac{7}{10}} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin^2 \gamma \chi_{n_2 20}^{(2)} \chi_{244}^{(2)} d\tau_2 - \frac{3}{2\sqrt{2}} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{240}^{(2)} d\tau_2 \\ & \left. - \int \tilde{\beta}_2^2 \left(3\sqrt{\frac{3}{5}} \cos^2 \gamma + \sqrt{\frac{5}{3}} \sin^2 \gamma \right) \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{242}^{(2)} d\tau_2 - \frac{\sqrt{7}}{2\sqrt{5}} \int \tilde{\beta}_2^2 \sin 2\gamma \chi_{n_2 22}^{(2)} \chi_{244}^{(2)} d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (\text{A.2.26})$$

onde $n_2 = 1$ ou $n_2 = 2$.

A.2.4 Densidades de transição entre estados $2_{n_2}^+$ e o estado 3_1^- .

Neste caso, somente vão existir as componentes com $\lambda = 1, 3$ e 5 :

$$\rho_1^{2_{n_2} \rightarrow 3_1}(r) = \frac{3 b_2 b_3}{70} \sqrt{\frac{15}{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D 3 \partial \rho(r)] \times \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos \gamma + \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \quad (\text{A.2.27})$$

$$\rho_3^{2_{n_2} \rightarrow 3_1}(r) = -\frac{b_2 b_3}{\sqrt{35}\pi} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos \gamma + \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \quad (\text{A.2.28})$$

$$\rho_5^{2_{n_2} \rightarrow 3_1}(r) = \frac{5 b_2 b_3}{7\sqrt{10}\pi} \partial^2 \rho(r) \left[\int \tilde{\beta}_2 \chi_{000}^{(2)} \left(\chi_{n_2 20}^{(2)} \cos \gamma + \sqrt{2} \chi_{n_2 22}^{(2)} \sin \gamma \right) d\tau_2 \right] \quad (\text{A.2.29})$$

onde $n_2 = 1$ ou $n_2 = 2$.

A.3 Densidades de transição reduzida no contexto do modelo vibracional puro

Dentro do contexto do modelo vibracional puro, o qual é um caso particular do GRVM quando $\tilde{\beta}_{20} = 0$ (núcleo sem deformação estática), as funções de onda são dados por:

$$\chi_{000}^{(2)} = \frac{e^{-\tilde{\beta}_2^2/4}}{\sqrt{3}\pi^{1/4}}, \quad (\text{A.3.1a})$$

$$\chi_{120}^{(2)} = \frac{\tilde{\beta}_2 e^{-\tilde{\beta}_2^2/4}}{\sqrt{15}\pi^{1/4}} \cos \gamma, \quad (\text{A.3.1b})$$

$$\chi_{122}^{(2)} = \frac{\tilde{\beta}_2 e^{-\tilde{\beta}_2^2/4}}{\sqrt{30}\pi^{1/4}} \sin \gamma, \quad (\text{A.3.1c})$$

$$\chi_{200}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{30}\pi^{1/4}} \left(\tilde{\beta}_2^2 - 5 \right) e^{-\tilde{\beta}_3^2/4}, \quad (\text{A.3.1d})$$

$$\chi_{220}^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{105}\pi^{1/4}} \tilde{\beta}_2^2 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4} \cos 2\gamma, \quad (\text{A.3.1e})$$

$$\chi_{222}^{(2)} = - \frac{1}{\sqrt{210}\pi^{1/4}} \tilde{\beta}_2^2 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4} \sin 2\gamma, \quad (\text{A.3.1f})$$

$$\chi_{240}^{(2)} = \frac{1}{6\sqrt{105}\pi^{1/4}} \tilde{\beta}_2^2 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4} (1 + 5 \cos^2 \gamma), \quad (\text{A.3.1g})$$

$$\chi_{242}^{(2)} = \frac{1}{6\sqrt{14}\pi^{1/4}} \tilde{\beta}_2^2 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4} \sin 2\gamma, \quad (\text{A.3.1h})$$

$$\chi_{244}^{(2)} = \frac{1}{6\sqrt{6}\pi^{1/4}} \tilde{\beta}_2^2 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4} \sin^2 \gamma, \quad (\text{A.3.1i})$$

$$\chi_{00}^{(3)} = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} e^{-\tilde{\beta}_3^2/4}, \quad (\text{A.3.1j})$$

$$\chi_{13}^{(3)} = \left(\frac{2}{\pi} \right)^{1/4} \frac{3\tilde{\beta}_3 e^{-\tilde{\beta}_3^2/4}}{\sqrt{3}}. \quad (\text{A.3.1k})$$

Sob essas condições as densidades de transições (A.2.3)-(A.2.29) têm uma forma analítica em sua totalidade.

A.3.1 Densidades diagonais.

a.

$$\rho_{0 \text{ (elast)}}^{g.s. \rightarrow g.s.}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{5b_2^2 + 3b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.2})$$

b.

$$\rho_0^{0_2 \rightarrow 0_2}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{9b_2^2 + 3b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.3})$$

c. Os estados 2_1^+ ($n_2 = 1$) e 2_2^+ ($n_2 = 2$) têm as componentes $\lambda = 0, 2$ e 4 .

$$\rho_0^{2_1 \rightarrow 2_1}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{7b_2^2 + 3b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.4})$$

$$\rho_0^{2_2 \rightarrow 2_2}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{9b_2^2 + 3b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.5})$$

$$\rho_2^{2_1 \rightarrow 2_1}(r) = -\sqrt{\frac{5}{14\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.6})$$

$$\rho_2^{2_2 \rightarrow 2_2}(r) = \frac{3}{7} \sqrt{\frac{5}{14\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.7})$$

$$\rho_4^{2_1 \rightarrow 2_1}(r) = \frac{3}{\sqrt{14\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.8})$$

$$\rho_4^{2_2 \rightarrow 2_2}(r) = \frac{6}{7} \sqrt{\frac{2}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.9})$$

d. O estado 4_2^+ tem componentes $\lambda = 0, 2$ e 4 :

$$\rho_0^{4_2 \rightarrow 4_2}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{9b_2^2 + 3b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D^2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.10})$$

$$\rho_2^{4_2 \rightarrow 4_2}(r) = -\frac{5}{7} \sqrt{\frac{11}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.11})$$

$$\rho_4^{4_2 \rightarrow 4_2}(r) = \frac{1}{7} \sqrt{\frac{143}{14\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.12})$$

e. O estado 3_1^- tem componentes $\lambda = 0, 2, 4$ e 6 :

$$\rho_0^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = 2\sqrt{\pi} \rho_{nd}(r) + \frac{5b_2^2 + 5b_3^2}{4\sqrt{\pi}} [\partial^2 \rho(r) - D2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.13})$$

$$\rho_2^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = -\frac{2b_3^2}{3\sqrt{3\pi}} \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.14})$$

$$\rho_4^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = \frac{15b_3^2}{11\sqrt{22\pi}} \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.15})$$

$$\rho_6^{3_1 \rightarrow 3_1}(r) = -\frac{1250b_3^2}{429\sqrt{33\pi}} \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.16})$$

A.3.2 Densidades de transição para excitações desde o g.s.

a.

$$\rho_0^{g.s. \rightarrow 0_2}(r) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{10}{\pi}} b_2^2 [\partial^2 \rho(r) - D2 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.17})$$

b.

$$\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_1}(r) = b_2 \partial \rho(r) \quad (\text{A.3.18})$$

$$\rho_2^{g.s. \rightarrow 2_2}(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.19})$$

c.

$$\rho_4^{g.s. \rightarrow 4_2}(r) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{5}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.20})$$

d.

$$\rho_3^{g.s. \rightarrow 3_1}(r) = \sqrt{\frac{3}{7}} b_3 \partial \rho(r) \quad (\text{A.3.21})$$

A.3.3 Densidades de transição entre estados excitados de quadrupolo.

$$\rho_2^{0_2 \rightarrow 2_1}(r) = \sqrt{\frac{2}{5}} b_2 \partial \rho(r) \quad (\text{A.3.22})$$

$$\rho_2^{0_2 \rightarrow 2_2}(r) = \sqrt{\frac{2}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.23})$$

$$\rho_4^{0_2 \rightarrow 4_2}(r) = \sqrt{\frac{2}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.24})$$

$$\rho_0^{2_1 \rightarrow 2_2}(r) = 0 \quad (\text{A.3.25})$$

$$\rho_2^{2_1 \rightarrow 2_2}(r) = -\sqrt{2} b_2 \partial \rho(r) \quad (\text{A.3.26})$$

$$\rho_4^{2_1 \rightarrow 2_2}(r) = \frac{27}{112\pi} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.27})$$

$$\rho_2^{2_1 \rightarrow 4_2}(r) = \sqrt{2} b_2 \partial \rho(r) \quad (\text{A.3.28})$$

$$\rho_2^{2_2 \rightarrow 4_2}(r) = \frac{2}{7} \sqrt{\frac{10}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.29})$$

$$\rho_4^{2_1 \rightarrow 4_2}(r) = 0 \quad (\text{A.3.30})$$

$$\rho_4^{2_2 \rightarrow 4_2}(r) = -\frac{5}{7} \sqrt{\frac{11}{7\pi}} b_2^2 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.31})$$

A.3.4 Densidades de transição entre estados $2_{n_2}^+$ e o estado 3_1^- .

Neste caso, somente vão existir as componentes com $\lambda = 1, 3$ e 5 :

$$\rho_1^{2_1 \rightarrow 3_1}(r) = \frac{3}{14} \sqrt{\frac{3}{\pi}} b_2 b_3 [\partial^2 \rho(r) - D 3 \partial \rho(r)] \quad (\text{A.3.32})$$

$$\rho_1^{2_2 \rightarrow 3_1}(r) = 0 \quad (\text{A.3.33})$$

$$\rho_3^{2_1 \rightarrow 3_1}(r) = -\frac{1}{\sqrt{7}\pi} b_2 b_3 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.34})$$

$$\rho_3^{2_2 \rightarrow 3_1}(r) = 0 \quad (\text{A.3.35})$$

$$\rho_5^{2_1 \rightarrow 3_1}(r) = \frac{5}{7\sqrt{2}\pi} b_2 b_3 \partial^2 \rho(r) \quad (\text{A.3.36})$$

$$\rho_5^{2_2 \rightarrow 3_1}(r) = 0 \quad (\text{A.3.37})$$

Apêndice B

Fator de forma generalizado na aproximação PWBA

Na contexto PWBA, o fator de forma para a transição entre dois estados quaisquer pode ser deduzido a partir transformada de Fourier da densidade de transição $\rho^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(\vec{r}) \equiv \langle \phi_{\eta IM} | \rho(\vec{r}) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle$:

$$F(q)_{\phi_{\eta' I' M'} \rightarrow \phi_{\eta IM}} = \int \langle \phi_{\eta IM} | \rho(\vec{r}) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (\text{B.0.1})$$

onde

$$e^{i \vec{q} \cdot \vec{r}} = 4\pi \sum_{\lambda \mu} i^\lambda j_\lambda(qr) Y_{\lambda \mu}^*(\Omega_q) Y_{\lambda \mu}(\Omega_r) \quad (\text{B.0.2})$$

e

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{\lambda' \mu'} \rho_{\lambda' \mu'}(r) Y_{\lambda' \mu'}^*(\Omega_r) \quad (\text{B.0.3})$$

Usando a propriedade de ortonormalidade dos harmônicos esféricos obtemos que:

$$\begin{aligned} F(q)_{\phi_{\eta' I' M'} \rightarrow \phi_{\eta IM}} &= 4\pi \sum_{\lambda \mu} i^\lambda Y_{\lambda \mu}^*(\Omega_q) \int \langle \phi_{\eta IM} | \rho_{\lambda \mu}(r) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle j_\lambda(qr) r^2 dr \\ &= 4\pi \sum_{\lambda \mu} i^\lambda Y_{\lambda \mu}^*(\Omega_q) \langle \phi_{\eta IM} | M_{\lambda \mu}(q) | \phi_{\eta' I' M'} \rangle \\ &= 4\pi \sum_{\lambda \mu} i^\lambda C_{M' \mu M}^{I' \lambda I} Y_{\lambda \mu}^*(\Omega_q) \int \rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r) j_\lambda(qr) r^2 dr \end{aligned} \quad (\text{B.0.4})$$

onde temos usados as identidades (2.2.7) e (3.1.12).

No resultado de $F(q)$ deve ser considerada uma normalização. Isso é feito levando em conta que, para o espalhamento elástico, quando o momento transferido é nulo ($q = 0$),

a seção de choque experimental vai ser igual à seção de choque de uma partícula puntual (Mott), é dizer, $F_{\text{elas}}(q = 0) = 1$. Com isso chegamos finalmente no resultado geral:

$$F(q)_{\phi_{\eta'I'M'} \rightarrow \phi_{\eta IM}} = \frac{4\pi}{Z} \sum_{\lambda\mu} i^\lambda C_{M'\mu M}^{I' \lambda I} Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_r) \int \rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r) j_{\lambda}(qr) r^2 dr \quad (\text{B.0.5})$$

Esse resultado permite enxergar a relação direta existente entre o fator de forma $F(q)_{\phi_{\eta'I'M'} \rightarrow \phi_{\eta IM}}$, a densidade de transição reduzida $\rho_{\lambda}^{\eta'; I' \rightarrow \eta; I}(r)$, e os termos $\langle \phi_{\eta IM} | M_{\lambda\mu} | \phi_{\eta'I'M'} \rangle$ presentes nos potenciais de acoplamento nas equações (2.2.5), (2.2.8), (3.1.14) e (3.1.15).

A expressão (B.0.5) pode então ser particularizada para a excitação do *g.s.* a estados $\eta; I$ (de spin I), e calcular o fator de forma ao quadrado. Este resultado pode ser comparado com dados experimentais. Assim sendo, temos que

$$\begin{aligned} |F(q)|_{g.s. \rightarrow \eta; I}^2 &= \left| \frac{4\pi}{Z} i^I \sum_M C_{0MM}^{0 I I} Y_{IM}^*(\Omega) \int \rho_I^{g.s. \rightarrow \eta; I}(r) j_I(qr) r^2 dr \right|^2 \\ &= \frac{4\pi (2I+1)}{Z^2} \left| \int \rho_I^{g.s. \rightarrow \eta; I}(r) j_I(qr) r^2 dr \right|^2; \end{aligned} \quad (\text{B.0.6})$$

que é a expressão usualmente conhecida para o fator de forma. Nessa dedução usamos que:

$$\sum_M Y_{IM}(\Omega) Y_{IM}^*(\Omega) = \frac{2I+1}{4\pi}. \quad (\text{B.0.7})$$

Apêndice C

Seção de choque de Mott

A seção de choque de Mott para o espalhamento de um elétron não polarizado incidente em um núcleo puntual (sem estrutura) de carga Ze é dada por [127, 128]:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{Mott}} = \frac{\eta^2}{k^2 \sin^2(\theta/2)} \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) |F|^2 + \frac{1}{k^2 \cos^2(\theta/2)} |G|^2, \quad (\text{C.0.1})$$

onde η é o parâmetro de Sommerfeld

$$\eta = \frac{Ze^2}{\hbar v}, \quad (\text{C.0.2})$$

e k está relacionado com a energia cinética e momento do elétron através de:

$$k = \frac{\sqrt{E^2 - m^2 c^4}}{\hbar c} = \frac{p}{\hbar}, \quad (\text{C.0.3})$$

sendo E a energia total do elétron e m a sua massa em repouso.

As amplitudes são dadas por:

$$F(\theta) = \frac{i}{2} \exp \{i\eta \ln [\sin^2(\theta/2)]\} \frac{\Gamma(1 - i\eta)}{\Gamma(1 + i\eta)} + F_1(\theta), \quad (\text{C.0.4})$$

$$G(\theta) = \frac{\eta \cos^2(\theta/2)}{2 \sin^2(\theta/2)} \exp \{i\eta \ln [\sin^2(\theta/2)]\} \frac{\Gamma(1 - i\eta)}{\Gamma(1 + i\eta)} + G_1(\theta), \quad (\text{C.0.5})$$

$$F_1(\theta) = \frac{i}{2} \left[D_1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} (-1)^\ell [\ell D_\ell + (\ell + 1) D_{\ell+1}] P_\ell(\cos \theta) \right], \quad (\text{C.0.6})$$

$$G_1(\theta) = \frac{i}{2} \left[-D_1 + \sum_{\ell=1}^{\infty} (-1)^\ell [\ell^2 D_\ell - (\ell+1)^2 D_{\ell+1}] P_\ell(\cos \theta) \right], \quad (\text{C.0.7})$$

onde P_ℓ são os polinômios de Legendre.

Os coeficientes são definidos como:

$$D_\ell = e^{-i\pi\ell} \frac{\Gamma(\ell - i\eta)}{\Gamma(\ell + 1 + i\eta)} - e^{-i\pi\rho_\ell} \frac{\Gamma(\rho_\ell - i\eta)}{\Gamma(\rho_\ell + 1 + i\eta)}, \quad (\text{C.0.8})$$

$$\rho_\ell = \sqrt{\ell^2 - (\alpha Z)^2}, \quad (\text{C.0.9})$$

onde α é a constante de estrutura fina dada por:

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \simeq \frac{1}{137}. \quad (\text{C.0.10})$$

Em altas energias, $v \approx c$, $E = \frac{mc^2}{\sqrt{1-v^2/c^2}} \gg mc^2$, $\eta \approx \alpha Z = \frac{Z}{137}$ e $k \approx \frac{E}{\hbar c}$, e assim a seção de choque pode ser obtida de

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Mott}} \approx \left[\frac{Ze^2 mc^2}{E^2 \sin(\theta/2)} \right]^2 |F|^2 + \left[\frac{\hbar c}{E \cos(\theta/2)} \right]^2 |G|^2, \quad (\text{C.0.11})$$

com $\eta \approx \alpha Z$ assumida em (C.0.4), (C.0.5) e (C.0.8).

Para $\alpha Z \ll 1$ a seção de choque de Mott pode ser aproximada a [129]

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Mott}} \approx \frac{Z^2 e^4 (1 - v^2/c^2)}{4m^2 v^4 \sin^4(\theta/2)} \left\{ 1 - \frac{v^2}{c^2} \sin^2(\theta/2) + \pi \alpha Z (v/c) \sin(\theta/2) \times \right. \\ \left. [1 - \sin(\theta/2)] + O(\alpha^2 Z^2) \right\}, \quad (\text{C.0.12})$$

a qual, para altas energias e com ordem zero em αZ , resulta em:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega} \right)_{\text{Mott}} \approx \frac{Z^2 e^4 \cos^2(\theta/2)}{4E^2 \sin^4(\theta/2)}. \quad (\text{C.0.13})$$

Essa última equação é comumente chamada de “seção de choque de Mott”. Não obstante, (C.0.12) e (C.0.13) não são suficientemente precisas quando usadas para núcleos pesados. Portanto, neste trabalho calculamos a seção de choque de Mott através da expressão (C.0.11).

Apêndice D

Resolução Numérica de Equações de Canais Acoplados

Nesta seção, vamos tratar de métodos numéricos para a resolução de um conjunto de equações diferenciais acopladas, escritas esquematicamente como:

$$-\frac{\partial^2 y_i(\rho)}{\partial \rho^2} + V_{ii}(\rho)y_i(\rho) + \sum_{i \neq j} V_{ij}(\rho)y_j(\rho) = E_i y_i(\rho) \quad (\text{D.0.1})$$

onde:

$$V_{ii}(\rho) = \frac{L_i(L_i + 1)}{\rho^2} + U_i(\rho) \quad (\text{D.0.2})$$

Nessas equações, o índice i (e j) assume valores desde zero até n , com as seguintes condições de contorno:

$$y_i(\rho = 0) = 0 \quad (\text{D.0.3})$$

$$y_0(\rho \rightarrow \infty) = \frac{i}{2}[H_0^-(\rho) - S_0 H_0^+(\rho)] \quad (\text{D.0.4})$$

$$y_{i \neq 0}(\rho \rightarrow \infty) = -\frac{i}{2}S_i H_i^+(\rho). \quad (\text{D.0.5})$$

Dessa forma, associamos o índice $i = 0$ ao canal elástico e os demais aos inelásticos. $H^\pm$ representam as correspondentes funções de Hankel. Observe que o termo $\frac{\hbar^2}{2\mu}$ não aparece multiplicando a derivada segunda na equação (D.0.1). Portanto, os potenciais e energias

envolvidos nessa equação correspondem àqueles da equação (2.1.10) divididos por E_{cm} , enquanto a variável $\rho = k_0 R$, onde k_0 é o número de onda do canal elástico. Dessa forma, em (D.0.1) está implícito que $E_{i=0} = 1$.

A resolução deste tipo de conjunto de equações não é trivial. De fato, problemas de convergência da solução podem ocorrer com frequência nos correspondentes cálculos numéricos. Três diferentes métodos têm sido usualmente utilizados para resolver as equações acopladas. No que segue, apresentaremos resumidamente esses métodos.

D.1 O Método Tradicional

As equações (D.0.1) podem ser integradas numericamente desde $\rho = 0$ até $\rho = \rho_{Max}$, onde $\rho = \rho_{Max}$ representa um ponto máximo, acima do qual os potenciais de acoplamento (para todos os canais) são desprezíveis, e os potenciais diagonais (centrais) são puramente coulombianos (de duas cargas pontuais). Ou seja, $\rho = \rho_{Max}$ é escolhido de tal forma que, para $\rho \geq \rho_{Max}$, as equações (D.0.4) e (D.0.5) são válidas com grande precisão.

Para efetuar a integração, na prática assume-se que a variável contínua ρ pode ser descrita por um conjunto discreto de valores $\rho_m = 0, h, 2h, \dots, mh, \dots, m_{Max}h$, onde h é o passo de integração. Como as equações (D.0.1) são equações diferenciais de segunda ordem, conhecendo-se as funções de onda (de todos os canais) em dois pontos, por exemplo, em $\rho = 0$ e $\rho = h$, é possível obter os valores das funções de onda em todos os outros pontos do espaço. Para isso, pode-se utilizar, por exemplo, o método de Numerov [130, 131, 132, 133].

No método de Numerov, utilizam-se duas variáveis auxiliares, ε e u , da seguinte forma:

$$\text{se } \frac{\partial^2 y_i(\rho)}{\partial \rho^2} = \sum_j \vartheta_{ij}(\rho) y_j(\rho) \Rightarrow y_i(\rho_m) = \varepsilon_i(\rho_m) + \frac{u_i(\rho_m)}{12} \quad (\text{D.1.1})$$

$$\varepsilon_i(\rho_m + h) = 2\varepsilon_i(\rho_m) - \varepsilon_i(\rho_m - h) + u_i(\rho_m) \quad (\text{D.1.2})$$

$$u_i(\rho_m) = \sum_j G_{ij}(\rho_m) \varepsilon_j(\rho_m) \quad (\text{D.1.3})$$

$$G_{ij}(\rho_m) = h^2 \vartheta_{ij}(\rho_m) + \frac{h^4}{12} \sum_k \vartheta_{ik}(\rho_m) \vartheta_{kj}(\rho_m) \quad (\text{D.1.4})$$

Observe que, conhecendo-se $\varepsilon_i(\rho_m)$ e $\varepsilon_i(\rho_{m-1}) = \varepsilon_i(\rho_m - h)$, a equação (D.1.2) permite obter $\varepsilon_i(\rho_{m+1}) = \varepsilon_i(\rho_m + h)$. Assim, a integração inicia na região $\rho_0 = 0$ e $\rho_1 = h$, sendo que a equação (D.1.2) propaga o resultado para valores maiores de ρ_m até atingir ρ_{max} . Para isso, em cada passo u_i é obtido com (D.1.3), onde G_{ij} é relacionado aos potenciais através da equação (D.1.4). No final do procedimento, obtêm-se os valores das respectivas funções de onda y_i , com a expressão (D.1.1), a partir dos valores de ε_i e u_i .

Como já comentado, para iniciar o processo de integração é necessário conhecer os valores das funções de onda (ou alternativamente da variável ε) nos pontos $\rho_0 = 0$ e $\rho_1 = h$. A equação (D.0.3) fornece esses valores para $\rho_0 = 0$, mas as funções de onda em $\rho_1 = h$ são desconhecidas a priori. Para tratar desta questão, usa-se o método descrito abaixo.

Resolve-se $n + 1$ vezes o conjunto das $n + 1$ equações acopladas, sendo que, em cada vez, utiliza-se condições diferentes em $\rho_1 = h$, de forma a obter $n + 1$ soluções linearmente independentes. Para isso, em cada vez que se integram as equações é adotado que:

$$\begin{aligned} \varepsilon_i(\rho_0 = 0) &= 0 \quad \text{para todo } i, \\ \varepsilon_i(\rho_1 = h) &= 0 \quad \text{para todo } i, \text{ exceto para } i=k \text{ com } \varepsilon_k(\rho_1 = h) = z, \end{aligned}$$

onde z é uma constante. Nas $n + 1$ vezes que fazemos a integração, o índice k percorre todo o conjunto de índices correspondentes aos diferentes canais. Vamos adotar, como notação, o símbolo $Y_i^{(k)}(\rho)$ para o conjunto de funções de onda obtido em cada uma dessas integrações. Obviamente, nenhuma dessas soluções $Y_i^{(k)}(\rho)$ obedece às condições de contorno (D.0.4) e (D.0.5). Porém, como temos agora n conjuntos de soluções linearmente independentes, podemos combinar esses conjuntos, de forma a obter uma solução compatível com as condições de contorno assintóticas. Fazemos:

$$y_i(\rho) = \sum_k a_k Y_i^{(k)}(\rho) \quad (\text{D.1.6})$$

e os coeficientes a_k são obtidos impondo as equações (D.0.4) e (D.0.5):

$$y_0(\rho \rightarrow \infty) = \sum_k a_k Y_0^{(k)}(\rho \rightarrow \infty) = \frac{i}{2} [H_0^-(\rho) - S_0 H_0^+(\rho)] \quad (\text{D.1.7})$$

$$y_{i \neq 0}(\rho \rightarrow \infty) = \sum_k a_k Y_{i \neq 0}^{(k)}(\rho \rightarrow \infty) = -\frac{i}{2} S_i H_i^+(\rho). \quad (\text{D.1.8})$$

As $n + 1$ equações (D.1.7) e (D.1.8) têm $2n + 2$ incógnitas ($n + 1$ valores de a_k e $n + 1$ valores de matriz S). Pode-se pensar que há menos equações que incógnitas. Porém, as equações (D.1.7) e (D.1.8) são válidas para qualquer $\rho \geq \rho_{Max}$. Assim, de fato o número de equações é suficiente para determinar os valores de todas as incógnitas. Para fazer isso, normalmente adotam-se as equações (D.1.7) e (D.1.8) para um ρ fixo e igual a ρ_{Max} , e também as derivadas primeiras (em relação à ρ) das equações (D.1.7) e (D.1.8), também calculadas em $\rho = \rho_{Max}$. Dessa forma, temos um conjunto de $2n + 2$ equações para $2n + 2$ incógnitas.

Em princípio, o conjunto de soluções encontradas com esse método deveria representar a solução exata das equações acopladas (D.0.1) (com o conjunto de condições de contorno D.0.3 a D.0.5). Porém, nem sempre isso ocorre. De fato, a integração numérica com passo finito h , utilizando as equações (D.1.1) a (D.1.4), só é solução exata das equações diferenciais no limite em que h tende a zero. Como esse limite exato é inatingível (num procedimento numérico), o que se faz é repetir o cálculo numérico para valores cada vez menores de h , até que os resultados (matriz S e funções de onda) fiquem invariantes. Isso é possível de ser obtido em alguns casos, mas em outros o procedimento falha. Na verdade, quando temos muitas equações acopladas, com funções de onda que devem ser calculadas em vários diferentes valores de ρ_m , as equações (D.1.1) a (D.1.4) são aplicadas um grande número de vezes. Em cada uma dessas vezes, existem erros de truncamento (ou arredondamento) decorrentes do número finito de algarismos significativos (para cada variável) utilizados nos cálculos computacionais. O resultado final expressa, então, essa grande somatória de erros. Observe que esse tipo de erro aumenta significativamente com a diminuição do passo de integração h , já que o número de vezes em que se utilizam as equações (D.1.1) a (D.1.4) é inversamente proporcional a h (a integração deve ser realizada até um valor fixo ρ_{max} , e assim o número de passos é igual a ρ_{max}/h). Além disso, o procedimento passa, também, pela inversão de uma matriz (correspondente à solução do conjunto de equações D.1.7, D.1.8 e respectivas derivadas), que também pode ser numericamente instável dependendo dos elementos dessa matriz.

Dessa forma, sempre que se utiliza algum método numérico para obter a solução de um conjunto de equações acopladas, devem ser adotados vários procedimentos para verificar se a solução encontrada é de fato representativa da solução real do problema. Discutiremos mais a frente os procedimentos que temos adotado nesse sentido.

D.2 O Método Iterativo

Através do método de funções de Green, é possível mostrar [134] que o conjunto de equações diferenciais (D.0.1), combinado com as equações de contorno (D.0.3) a (D.0.5), é matematicamente equivalente a um conjunto de equações integrais, dado por:

$$y_i(\rho) = y_0^{Ot}(\rho)\delta_{i0} - \frac{k_0}{k_i} \left[y_i^{Ot}(\rho) \int_{\rho}^{\infty} y_i^{Irr}(\rho') \sum_{j \neq i} V_{ij}(\rho') y_j(\rho') d\rho' + y_i^{Irr}(\rho) \int_{\rho}^{\infty} y_i^{Ot}(\rho') \sum_{j \neq i} V_{ij}(\rho') y_j(\rho') d\rho' \right] \quad (\text{D.2.1})$$

onde k_i representa o número de onda do canal i e δ_{i0} é o delta de Kronecker. As funções de onda ótica e irregular que aparecem nessa expressão são definidas abaixo.

A função de onda ótica é a solução da seguinte equação diferencial desacoplada:

$$-\frac{\partial^2 y_i^{Ot}(\rho)}{\partial \rho^2} + V_{ii}(\rho) y_i^{Ot}(\rho) = E_i y_i^{Ot}(\rho) \quad (\text{D.2.2})$$

com condição de contorno assintótica dada por:

$$y_i^{Ot}(\rho = 0) = 0; \quad y_i^{Ot}(\rho \rightarrow \infty) = \frac{i}{2} [H_i^-(\rho) - S_i^{Op} H_i^+(\rho)] \quad (\text{D.2.3})$$

Observe que a condição de contorno (D.2.3) é uma condição de canal elástico, mas ela deve ser usada para todos os canais (inelásticos também) para obter as correspondentes funções de onda óticas. Os elementos S_i^{Op} da equação (D.2.3) são chamados de matriz S ótica.

As funções de onda irregulares obedecem a uma equação semelhante à (D.2.2), a saber:

$$-\frac{\partial^2 y_i^{Irr}(\rho)}{\partial \rho^2} + V_{ii}(\rho) y_i^{Irr}(\rho) = E_i y_i^{Irr}(\rho) \quad (\text{D.2.4})$$

Mas agora com a seguinte condição assintótica:

$$y_i^{Irr}(\rho \rightarrow \infty) = \frac{i}{2} H_i^-(\rho) \quad (\text{D.2.5})$$

Essa função é chamada de irregular porque diverge quando ρ tende a zero. Como a função de onda irregular é bem determinada para ρ grande, veja (D.2.5), para obtê-la em toda região de raios integra-se a equação (D.2.4) de “traz pra frente”, ou seja, de valores grandes de ρ para $\rho \rightarrow 0$.

Observe que as equações (D.2.2) e (D.2.3) são equações diferenciais para apenas um canal (estão desacopladas) e, portanto, são facilmente integráveis numericamente. Dessa forma, a determinação das funções de onda ótica e irregular pode ser realizada sem qualquer problema numérico.

Conhecendo-se $y_i^{Ot}(\rho)$ e $y_i^{Irr}(\rho)$, pode-se obter a função de onda (de canais acoplados) para o canal i através da equação (D.2.1). Porém, para isso, é necessário conhecer o conjunto de funções de onda (de canais acoplados) para todos os outros canais j (lado direito da equação D.2.1). Dessa forma, (D.2.1) representa, de fato, um conjunto de equações integrais acopladas.

As matrizes S correspondentes ao problema de canais acoplados, equações (D.0.4) e (D.0.5), podem ser encontradas no contexto do método de Green através de:

$$S_i = S_i^{Op} \delta_{i0} - 2i \frac{k_0}{k_i} \int_{\rho}^{\infty} y_i^{Ot}(\rho') \sum_{j \neq i} V_{ij}(\rho') y_j(\rho') d\rho' \quad (\text{D.2.6})$$

O método iterativo utiliza a equação (D.2.1) para resolver numericamente o problema de canais acoplados. O procedimento adotado é descrito abaixo.

Em cada iteração, teremos funções de onda calculadas para todos os canais. Vamos denominar a função de onda do canal i na iteração k por $y_i^k(\rho)$. A relação da função de onda na iteração $k+1$ com as funções de onda da iteração k é dada por:

$$y_i^{(k+1)}(\rho) = y_i^{Ot}(\rho) \delta_{i0} - \frac{k_0}{k_i} \left[y_i^{Ot}(\rho) \int_{\rho}^{\infty} y_i^{Irr}(\rho') \sum_{j \neq i} V_{ij}(\rho') y_j^{(k)}(\rho') d\rho' + y_i^{Irr}(\rho) \int_{\rho}^{\infty} y_i^{Ot}(\rho') \sum_{j \neq i} V_{ij}(\rho') y_j^{(k)}(\rho') d\rho' \right] \quad (\text{D.2.7})$$

Obviamente, a expressão (D.2.7) está baseada na equação (D.2.1). A interação zero começa com as seguintes funções de onda:

$$y_0^0(\rho) = y_0^{Ot}(\rho); \quad y_{i \neq 0}^0(\rho) = 0. \quad (\text{D.2.8})$$

Se, a partir de certa interação k , obtivermos $y_i^{k+1}(\rho) = y_i^k(\rho)$ para todos os canais, então (D.2.1) é matematicamente equivalente à (D.2.7), e as funções de onda exatas de canais acoplados foram obtidas. A equação (D.2.6) pode então ser usada para obter as correspondentes matrizes S .

Quando, a cada nova interação, as funções de onda obtidas se aproximam cada vez mais das funções de onda da interação anterior, o método converge. Porém, não há segurança de convergência e, de fato, às vezes pode ocorrer que, a cada interação, o conjunto de funções de onda calculadas afaste-se cada vez mais da solução exata.

Cabe aqui uma importante observação. De certa forma, a equação (D.2.6) representa uma aproximação da matriz S exata, mesmo quando essa equação é utilizada antes que a convergência das funções de onda tenha ocorrido. Por exemplo, essa expressão pode ser utilizada já com as funções de onda correspondentes à interação zero: equações (D.2.8). Nesse caso, a matriz S do canal elástico será igual à correspondente matriz S ótica, enquanto os elementos da matriz S dos inelásticos estarão sendo calculados em ordem zero (que considera, de forma aproximada, somente o acoplamento direto entre o canal elástico e o inelástico, e que despreza totalmente os acoplamentos entre canais inelásticos). Esse procedimento produz bom resultado quando os acoplamentos são fracos e, portanto, não afetam muito o canal elástico (em relação ao cálculo ótico). Se considerarmos esse procedimento em ordem um, então também a matriz S elástica torna-se diferente da ótica. Esse tipo de cálculo é chamado de aproximação DWBA (do inglês *Distorted-Wave Born Approximation*).

D.3 O Método da Matriz R

O método da Matriz R foi desenvolvido de forma independente, tanto em física atômica como em nuclear. Por um lado esse método pode ser utilizado de forma fenomenológica, na análise

de dados experimentais de seções de choque, através de uma parametrização da Matriz S (ligada à Matriz R). Por outro, pode também ser usado na resolução de equações acopladas, como tratado neste apêndice. Uma revisão do método pode ser encontrada em [135, 136], enquanto um pacote FORTRAN para a solução de equações acopladas é fornecido em [137].

No problema de canais acoplados, procura-se obter as funções de onda $y_i(\rho)$, soluções da equação (D.0.1), na região radial desde $\rho = 0$ até $\rho = \rho_{Max}$, com condições de contorno dadas por (D.0.3) a (D.0.5). Dentro do método da matriz R , assumimos que as funções de onda, na região $0 \leq \rho \leq \rho_{Max}$, podem ser descritas (de forma aproximada) por uma combinação linear de um número finito de funções de Lagrange:

$$y_i(\rho) = \sum_{k=1}^N a_{ik} \varphi_k(\rho) \quad (\text{D.3.1})$$

onde as funções de Lagrange são definidas por:

$$\varphi_k(\rho) = (-1)^{N+k} \sqrt{\rho_{Max} x_k (1 - x_k)} \frac{\rho P_N(2\rho/\rho_{Max} - 1)}{\rho_{Max} x_k (\rho - \rho_{Max} x_k)} \quad (\text{D.3.2})$$

em que $P_N(x)$ é o polinômio de Legendre de grau N , e os x_k correspondem aos valores obtidos (soluções) da equação:

$$P_N(2x_k - 1) = 0 \quad (\text{D.3.3})$$

Então, resolver o conjunto de equações acopladas significa, neste contexto, obter os valores dos coeficientes da equação (D.3.1). Obviamente, quanto maior for o número N de funções (e coeficientes) considerado em (D.3.1), melhor será a aproximação da solução obtida em relação à solução exata das equações de canais acoplados.

O método da Matriz R é superior aos métodos tradicional e iterativo para problemas que envolvem estados excitados de grande energia de excitação ou estados virtuais. Nesse caso, a convergência numérica dos resultados é muito mais facilmente obtida com o método da matriz R . Entretanto, nos casos em que há um grande número de canais acoplados, o método da matriz R torna-se impraticável, por envolver a inversão de matrizes com um número enorme de elementos. Por esse motivo, esse método não é apropriado no caso do presente trabalho. Assim sendo, não daremos maiores detalhes do método.

D.4 O método utilizado neste trabalho

O programa que construímos permite utilizar tanto o método tradicional como o iterativo. De fato, verificamos que o método tradicional converge com facilidade para momentos angulares pequenos (de $J = 0$ até valores de J um pouco acima do “grazing”), enquanto o método iterativo obtém melhor desempenho para altos momentos angulares. Assim, o programa utiliza o método tradicional até certo valor de J (definido pelo usuário) e depois disso utiliza o método iterativo. Além disso, para valores de J muito grandes, há também a possibilidade de acoplar os estados inelásticos conforme a aproximação DWBA.

Para momentos angulares muito grandes, em raios bem pequenos a função de onda pode tornar-se extremamente pequena, devido à repulsão centrífuga. Isso é também fonte de importantes problemas numéricos. Para resolver essa questão, é possível adotar a condição de contorno (D.0.3) num raio maior que zero: $y_i(\rho = \rho_{Min}) = 0$. De fato, nessas condições os observáveis (matrizes S) são totalmente independentes da escolha de ρ_{Min} (a não ser que este seja grande demais). O programa permite ao usuário escolher esse nível de “corte”.

D.5 Procedimentos para avaliar a convergência

Para cada momento angular total J , o programa realiza vários cálculos para testar a convergência numérica dos resultados obtidos, como descrito a seguir.

Como um primeiro critério de convergência, é feito um teste de conservação do fluxo total de partículas. De fato, o fluxo perdido pelo canal elástico (que é igual à seção de choque de reação) deve ser exatamente igual ao fluxo ganho pelos canais inelásticos e pela fusão. Ao invés de trabalhar com as respectivas seções de choque, é preferível testar o resultado utilizando as correspondentes matrizes S . Devemos ter:

$$\sum_{i=0}^N \frac{k_i}{k_0} |S_i|^2 + |S_{Fus}|^2 = 1 \quad (\text{D.5.1})$$

onde N é o número total de canais acoplados e a matriz S correspondente à fusão é definida

como:

$$|S_{Fus}|^2 = -\frac{4k_0}{E_{c.m.}} \int_0^\infty W(R)|F(R)|^2 dR \quad (\text{D.5.2})$$

Observe que (D.5.2) está conectada com a seção de choque de fusão através da expressão (2.4.16). Dessa maneira, um primeiro parâmetro de convergência é dado por:

$$P_1 = \left| 1 - |S_{Fus}|^2 - \sum_i \frac{k_i}{k_0} |S_i|^2 \right| \quad (\text{D.5.3})$$

Devemos ter $P_1 \ll 1$. Na prática, consideramos que $P_1 < 10^{-3}$ é suficiente.

Os outros testes que realizamos dependem do método que é utilizado para resolver as equações acopladas.

D.5.1 Convergência do Método Tradicional

Conforme discutido no item D.1, conhecendo-se os valores de todas as funções de onda nos pontos $\rho_0 = 0$ e $\rho_1 = h$, é possível obter as funções de onda para qualquer outro valor de $\rho_m = mh$ utilizando as equações (D.1.1) a (D.1.4). Porém, como os valores das funções em $\rho_1 = h$ são desconhecidos a priori, resolve-se as equações acopladas várias vezes e se obtém a solução final tomando uma combinação linear apropriada (equação D.1.6). Neste ponto, portanto, acaba-se por saber os valores das funções de onda para qualquer valor de $\rho_m = mh$, inclusive para $\rho = \rho_1 = h$. Assim sendo, é possível partir, agora, dos valores das funções de onda em $\rho_0 = 0$ e $\rho_1 = h$, e refazer a integração (usando equações D.1.1 a D.1.4) até $\rho = \rho_{Max}$. As funções de onda e respectivas matrizes S obtidas dessa forma deveriam ser idênticas àquelas obtidas pelo uso da combinação linear (equações D.1.6 a D.1.8). Porém, devido a razões já comentadas, nem sempre isso acontece.

Como notação, vamos dizer que, após a (nova) integração direta das equações acopladas (conforme explicado no parágrafo anterior), obtemos as seguintes funções de onda assintóticas:

$$y_0(\rho = \rho_{Max}) = \frac{i}{2} [H_0^-(\rho_{Max}) - C_0 H_0^+(\rho_{Max})] \quad (\text{D.5.4})$$

$$y_{i \neq 0}(\rho = \rho_{Max}) = \frac{i}{2} [D_i H_i^-(\rho_{Max}) - C_i H_i^+(\rho_{Max})] \quad (\text{D.5.5})$$

Se o cálculo estiver correto (se a convergência for boa) deveríamos ter:

$$D_i = 0; \quad C_i = S_i \quad (\text{D.5.6})$$

para todos os canais (compare equações D.5.4 e D.5.5 com D.5.1 e D.5.2). Em (D.5.6) S_i representa a matriz S (para o canal i) obtida utilizando a (anterior) combinação linear de funções. Então, definimos os dois seguintes novos parâmetros de convergência:

$$P_2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |D_i| \quad (\text{D.5.7})$$

$$P_3 = \frac{|C_0 - S_0|}{|C_0| + |S_0|} \quad (\text{D.5.8})$$

$$P_4 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|C_i - S_i|}{|C_i| + |S_i|} \quad (\text{D.5.9})$$

O critério de boa convergência é $P_2 \ll 1$, $P_3 \ll 1$ e $P_4 \ll 1$. Na prática utilizamos: $P_2 < 10^{-3}$, $P_3 < 10^{-3}$ e $P_4 < 10^{-3}$.

D.5.2 Convergência do Método Iterativo

Um bom critério para a verificação da convergência do método iterativo é a comparação dos valores obtidos para as matrizes S (de todos os canais) entre duas iterações consecutivas. Porém, para que tenhamos, de fato, uma convergência satisfatória, é necessário também que as funções de onda (de todos os canais) tenham os mesmos valores (em todos os raios) para duas iterações consecutivas. Para levar em conta essas condições, definimos os seguintes parâmetros de convergência:

$$P_5 = \frac{|S_0^{n+1} - S_0^n|}{|S_0^{n+1}| + |S_0^n|} \quad (\text{D.5.10})$$

$$P_6 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|S_i^{n+1} - S_i^n|}{|S_i^{n+1}| + |S_i^n|} \quad (\text{D.5.11})$$

onde os índices n e $n + 1$ se referem a duas iterações consecutivas. Portanto, P_5 mede a convergência do canal elástico e P_6 representa uma média sobre os canais inelásticos. Com

relação às funções de onda, estabelecemos um critério apenas para a função de onda do canal elástico:

$$P_7 = \frac{1}{M} \sum_{m=1}^M \frac{|y_0^{n+1}(m\rho) - y_0^n(m\rho)|}{|y_0^{n+1}(m\rho)| + |y_0^n(m\rho)|} \quad (\text{D.5.12})$$

De novo, consideramos uma boa convergência quando obtemos: $P_5 < 10^{-3}$, $P_6 < 10^{-3}$ e $P_7 < 10^{-3}$.

Referências Bibliográficas

- [1] L. C. Chamon and B. V. Carlson. Systematics of nuclear densities, deformations and excitation energies within the context of the generalized rotation–vibration model. *Nuclear Physics A*, 846(1-4):1–30, nov 2010.
- [2] D. F. Morales Botero, L. C. Chamon, and B. V. Carlson. Calculation of deformed double-folding potentials in the context of the generalized rotation-vibration model. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 41(5):055114, may 2014.
- [3] M. Dasgupta, D. J. Hinde, N. Rowley, and A. M. Stefanini. Measuring barriers to fusion. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 48(1):401–461, dec 1998.
- [4] K. Hagino and N. Takigawa. Subbarrier Fusion Reactions and Many-Particle Quantum Tunneling. *Progress of Theoretical Physics*, 128(6):1061–1106, dec 2012.
- [5] B. B. Back, H. Esbensen, C. L. Jiang, and K. E. Rehm. Recent developments in heavy-ion fusion reactions. *Reviews of Modern Physics*, 86(1):317–360, mar 2014.
- [6] A. Mukherjee, D. J. Hinde, M. Dasgupta, K. Hagino, J. O. Newton, and R. D. Butt. Failure of the Woods-Saxon nuclear potential to simultaneously reproduce precise fusion and elastic scattering measurements. *Physical Review C*, 75(4):044608, apr 2007.
- [7] L. C. Chamon, G. P. A. Nobre, and B. V. Carlson. Effect on the heavy-ion fusion and elastic scattering cross sections of common approximations assumed in coupled-channel calculations. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 36(2):025102, feb 2009.

- [8] J. M. Eisenberg and W. Greiner. *Nuclear models: collective and single-particle phenomena*. Number v. 1-2 in Nuclear Theory. North-Holland, 1970.
- [9] I. J. Thompson. Coupled reaction channels calculations in nuclear physics. *Computer Physics Reports*, 7(4):167–212, apr 1988.
- [10] H. De Vries, C. W. De Jager, and C. De Vries. Nuclear charge-density-distribution parameters from elastic electron scattering. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 36(3):495–536, may 1987.
- [11] R. H. Helm. Inelastic and elastic scattering of 187-mev electrons from selected even-even nuclei. *Phys. Rev.*, 104:1466–1475, dec 1956.
- [12] L. J. Tassie. A Model of Nuclear Shape Oscillations for γ -transitions and Electron Excitation. *Australian Journal of Physics*, 9(4):407–418, 1956.
- [13] B. V. Carlson and D Hirata. Dirac-Hartree-Bogoliubov approximation for finite nuclei. *Physical Review C*, 62(5):054310, oct 2000.
- [14] W. Greiner, J. A. Maruhn, and D. A. Bromley. *Nuclear Models*. Springer London, Limited, 1997.
- [15] G. R. Satchler and W. G. Love. Folding model potentials from realistic interactions for heavy-ion scattering. *Physics Reports*, 55(3):183–254, oct 1979.
- [16] L. C. Chamon, B. V. Carlson, L. R. Gasques, D. Pereira, C. De Conti, M. A. G. Alvarez, M. S. Hussein, M. A. Cândido Ribeiro, E. S. Rossi Jr., and C. P. Silva. Toward a global description of the nucleus-nucleus interaction. *Physical Review C*, 66(1):014610, jul 2002.
- [17] G. R. Satchler. *Direct nuclear reactions*. International series of monographs on physics. Clarendon Press, 1983.
- [18] L. C. Chamon, L. R. Gasques, L. F. M. Alves, V. Guimarães, P. Descouvemont, R. J. DeBoer, and M. Wiescher. Effect of the inelastic couplings on the scattering of alpha

- particles by 12 C at low energies. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 41(3):035101, mar 2014.
- [19] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied mathematics series. Dover Publications, 1964.
 - [20] H. Überall. *Electron scattering from complex nuclei*, volume 36. Academic Press, Inc, New York, 1971.
 - [21] J. J. Sakurai and J. Napolitano. *Modern Quantum Mechanics*. Addison-Wesley, 2011.
 - [22] M. E. Rose. *Elementary Theory of Angular Momentum*. Dover books on physics and chemistry. Dover, 1995.
 - [23] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Investigations in Physics. Princeton University Press, 1996.
 - [24] R. Hofstadter. Electron scattering and nuclear structure. *Rev. Mod. Phys.*, 28:214–254, Jul 1956.
 - [25] J. D. Walecka. *Electron Scattering for Nuclear and Nucleon Structure*. Cambridge Monographs on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology. Cambridge University Press, 2001.
 - [26] R. C. Barrett. Nuclear charge distributions. *Reports on Progress in Physics*, 37(1):1–54, jan 1974.
 - [27] J. Heisenberg and H. P. Blok. Inelastic Electron Scattering From Nuclei. *Annual Review of Nuclear and Particle Science*, 33(1):569–610, dec 1983.
 - [28] J. M. Yao, M. Bender, and P. H. Heenen. Beyond-mean-field study of elastic and inelastic electron scattering off nuclei. *Physical Review C*, 91(2):024301, feb 2015.
 - [29] R. Hofstadter, H. R. Fechter, and J. A. McIntyre. High-energy electron scattering and nuclear structure determinations. *Phys. Rev.*, 92:978–987, Nov 1953.

- [30] M. Wakasugi, T. Suda, and Y. Yano. A new method for electron-scattering experiments using a self-confining radioactive ion target in an electron storage ring. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 532(1-2):216–223, oct 2004.
- [31] T. Suda. Structure Studies of Unstable Nuclei by Electron Scattering. In *AIP Conference Proceedings*, volume 793, pages 264–277. AIP, 2005.
- [32] T. Suda, M. Wakasugi, T. Emoto, K. Ishii, S. Ito, K. Kurita, A. Kuwajima, A. Noda, T. Shirai, T. Tamae, H. Tongu, S. Wang, and Y. Yano. First Demonstration of Electron Scattering Using a Novel Target Developed for Short-Lived Nuclei. *Physical Review Letters*, 102(10):102501, mar 2009.
- [33] H. Simon. The ELISe experiment at FAIR. *Nuclear Physics A*, 787(1-4):102–109, may 2007.
- [34] A. N. Antonov and *et al.* The electron–ion scattering experiment ELISe at the International Facility for Antiproton and Ion Research (FAIR)—A conceptual design study. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 637(1):60–76, may 2011.
- [35] I. A. Koop, Y. M. Shatunov, V. G. Nedorezov, A. S. Fomichev, and L. V. Chulkov. Electron-ion collider at the fair facility for antiproton and ion research (ELISe Project). *Atomic Energy*, 112(2):110–118, jun 2012.
- [36] Z. Wang and Z. Ren. Elastic electron scattering on exotic light proton-rich nuclei. *Physical Review C*, 70(3):034303, sep 2004.
- [37] A. N. Antonov, D. N. Kadrev, M. K. Gaidarov, E. Moya de Guerra, P. Sarriuren, J. M. Udias, V. K. Lukyanov, E. V. Zemlyanaya, and G. Z. Krumova. Charge and matter distributions and form factors of light, medium, and heavy neutron-rich nuclei. *Physical Review C*, 72(4):044307, oct 2005.
- [38] C. A. Bertulani. Probing nuclear skins and halos with elastic electron scattering. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 34(2):315–333, feb 2007.

- [39] X. Roca-Maza, M. Centelles, F. Salvat, and X. Viñas. Theoretical study of elastic electron scattering off stable and exotic nuclei. *Physical Review C*, 78(4):044332, oct 2008.
- [40] X. Roca-Maza, M. Centelles, F. Salvat, and X. Viñas. Electron scattering in isotonic chains as a probe of the proton shell structure of unstable nuclei. *Physical Review C*, 87(1):014304, jan 2013.
- [41] S. Karataglidis. Electron scattering and reactions from exotic nuclei. *The European Physical Journal A*, 53(4):70, apr 2017.
- [42] W. Reuter, E. B. Shera, M. V. Hoehn, F. W. Hersman, T. Milliman, J. M. Finn, C. Hyde-Wright, R. Lourie, B. Pugh, and W. Bertozzi. Ground-state and transition charge densities in ^{192}Os . *Physical Review C*, 30(5):1465–1479, nov 1984.
- [43] T. N. Buti, J. Kelly, W. Bertozzi, J. M. Finn, F. W. Hersman, C. Hyde-Wright, M. V. Hynes, M. A. Kovash, S. Kowalski, R. W. Lourie, B. Murdock, B. E. Norum, B. Pugh, C. P. Sargent, W. Turchinets, and B. L. Berman. Electroexcitation of isoscalar states in ^{16}O . *Physical Review C*, 33:755–775, Mar 1986.
- [44] B. A. Brown, R. Radhi, and B. H. Wildenthal. Electric quadrupole and hexadecupole nuclear excitations from the perspectives of electron scattering and modern shell-model theory. *Physics Reports*, 101(5):313–358, 1983.
- [45] Phan-Xuan-Ho, H. G. Andresen, L. S. Cardman, J. M. Cavedon, J. C. Clemens, B. Frois, M. Girod, D. Gogny, D. Goutte, B. Grammaticos, R. Hofmann, M. Huet, P. Leconte, S. K. Platchkov, I. Sick, and S. E. Williamson. Electron scattering studies of the ground state rotational band of ^{152}Sm . *Physical Review C*, 38(3):1173–1189, sep 1988.
- [46] T. de Forest and J. D. Walecka. Electron scattering and nuclear structure. *Advances in Physics*, 15(57):1–109, jan 1966.
- [47] T. W. Donnelly and J. D. Walecka. Electron Scattering and Nuclear Structure. *Annual Review of Nuclear Science*, 25(1):329–405, dec 1975.

- [48] S. S. M. Wong. *Introductory Nuclear Physics*. A Wiley-Interscience publication. Wiley, 1998.
- [49] M. A. Duguay, C. K. Bockelman, T. H. Curtis, and R. A. Eisenstein. Inelastic electron scattering from ni^{58} , ni^{60} , and ni^{62} . *Phys. Rev.*, 163:1259–1277, Nov 1967.
- [50] D. R. Yennie, D. G. Ravenhall, and R. N. Wilson. Phase-shift calculation of high-energy electron scattering. *Phys. Rev.*, 95:500–512, Jul 1954.
- [51] G. C. Li, M. R. Yearian, and I. Sick. High-momentum-transfer electron scattering from ^{24}Mg , ^{27}Al , ^{28}Si , and ^{32}S . *Phys. Rev. C*, 9:1861–1877, May 1974.
- [52] L. S. Cardman, D. H. Dowell, R. L. Gulbranson, D. G. Ravenhall, and R. L. Mercer. Coupled-channel analysis of high-energy electron scattering by ^{152}Sm and $^{166}\text{Er}^*$. *Physical Review C*, 18(3):1388–1417, sep 1978.
- [53] J. F. Ziegler and G. A. Peterson. Excitation of pb^{206} , pb^{207} , pb^{208} , and bi^{209} by inelastic electron scattering. *Phys. Rev.*, 165:1337–1351, Jan 1968.
- [54] A. Bohr and B. R. Mottelson. *Nuclear Structure: Volume 2, Nuclear deformations*. Nuclear Structure. Benjamin, 1969.
- [55] J. L. Friar and J. W. Negele. *Theoretical and Experimental Determination of Nuclear Charge Distributions*, pages 219–376. Springer US, Boston, MA, 1975.
- [56] J. Heisenberg. *Nuclear Transition Density Determinations from Inelastic Electron Scattering*, pages 61–133. Springer US, Boston, MA, 1981.
- [57] B. Pritychenko, M. Birch, B. Singh, and M. Horoi. Tables of E2 transition probabilities from the first $2+$ states in even-even nuclei. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 107:1–139, jan 2016.
- [58] T. Kibédi and R. H. Spear. Reduced electric-octupole transition probabilities, $\text{b}(e3; 0_1^+ \rightarrow 3_1^-)$ - an update. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 80(1):35–82, jan 2002.

- [59] I. Angeli and K. P. Marinova. Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 99(1):69–95, jan 2013.
- [60] I. Sick and J. S. McCarthy. Elastic electron scattering from ^{12}C and ^{16}O . *Nuclear Physics A*, 150(3):631–654, jul 1970.
- [61] W. Reuter, G. Fricke, K. Merle, and H. Miska. Nuclear charge distribution and rms radius of ^{12}C from absolute electron scattering measurements. *Physical Review C*, 26(3):806–818, sep 1982.
- [62] A. Nakada, Y. Torizuka, and Y. Horikawa. Determination of the Deformation in ^{12}C from Electron Scattering. *Physical Review Letters*, 27(11):745–748, 1971.
- [63] H. Crannell. Elastic and Inelastic Electron Scattering from ^{12}C and ^{16}O . *Physical Review*, 148(3):1107–1118, aug 1966.
- [64] H. L. Crannell and T. A. Griffy. Determination of Radiative Transition Widths of Excited States in ^{12}C . *Physical Review*, 136(6B):B1580–B1584, dec 1964.
- [65] Y. Horikawa, Y. Torizuka, A. Nakada, S. Mitsunobu, Y. Kojima, and M. Kimura. The deformations in ^{20}Ne , ^{24}Mg and ^{28}Si from electron scattering. *Physics Letters B*, 36(1):9–11, aug 1971.
- [66] A. Johnston and T. E. Drake. A study of ^{24}Mg by inelastic electron scattering. *Journal of Physics A: Mathematical, Nuclear and General*, 7(8):898–935, may 1974.
- [67] E. Borie, D. Drechsel, and K. Lezu. Inelastic electron scattering in the generalized collective model. *Nuclear Physics A*, 211(2):393–404, sep 1973.
- [68] A. Nakada and Y. Torizuka. Determination of the deformations in ^{24}Mg and ^{28}Si nuclei from electron scattering. *Journal of the Physical Society of Japan*, 32(1):1–13, 1972.
- [69] H. Zarek, S. Yen, B. O. Pich, T. E. Drake, C. F. Williamson, S. Kowalski, and C. P. Sargent. Inelastic electron scattering to negative parity states of ^{24}Mg . *Physical Review C*, 29(5):1664–1671, 1984.

- [70] S. W. Brain, A. Johnston, W. A. Gillespie, E. W. Lees, and R. P. Singhal. The ground-state charge distribution of the silicon isotopes and the excited states of ^{28}Si , ^{30}Si . *Journal of Physics G: Nuclear Physics*, 3(6):821–832, 1977.
- [71] S. Yen, R. J. Sobie, T. E. Drake, H. Zarek, C. F. Williamson, S. Kowalski, and C. P. Sargent. Inelastic electron scattering to negative parity states of ^{28}Si . *Phys. Rev. C*, 27:1939–1956, May 1983.
- [72] R. Lombard, P. Kossanyi-Demay, and G. R. Bishop. The scattering of high-energy electrons by S32. *Nuclear Physics*, 59(3):398–416, oct 1964.
- [73] B. B. P. Sinha, G. A. Peterson, R. R. Whitney, I. Sick, and J. S. McCarthy. Nuclear charge distributions of isotone pairs. ii. ^{39}K and ^{40}Ca . *Phys. Rev. C*, 7:1930–1938, May 1973.
- [74] P. L. Hallowell, W. Bertozzi, J. Heisenberg, S. Kowalski, X. Maruyama, C. P. Sargent, W. Turchinets, C. F. Williamson, S. P. Fivozinsky, J. W. Lightbody, and S. Penner. Electron scattering from ^{19}F and ^{40}Ca . *Phys. Rev. C*, 7:1396–1409, Apr 1973.
- [75] R. A. Eisenstein, D. W. Madsen, and H. Theissen. Electron-Scattering Studies on Ca 40 and Ca 48. *Physical Review*, 188(4):1815–1830, 1969.
- [76] K. Itoh, M. Oyamada, and Y. Torizuka. Study of nuclear states in ^{40}Ca by inelastic electron scattering. *Phys. Rev. C*, 2:2181–2199, Dec 1970.
- [77] J. E. Wise, J. S. McCarthy, R. Altemus, B. E. Norum, R. R. Whitney, J. Heisenberg, J. Dawson, and O. Schwentker. Inelastic electron scattering from ^{48}Ca . *Phys. Rev. C*, 31:1699–1714, May 1985.
- [78] J. W. Lightbody, S. Penner, S. P. Fivozinsky, P. L. Hallowell, and H. Crannell. Electron scattering from vibrational nuclei. *Phys. Rev. C*, 14:952–964, Sep 1976.
- [79] J. W. Lightbody, J. B. Bellicard, J. M. Cavedon, B. Frois, D. Goutte, M. Huet, P. Leconte, A. Nakada, Phan Xuan Ho, S. K. Platchkov, S. Turck-Chieze, C. W. de Jager, J. J. Lapikás, and P. K. A. de Witt Huberts. Elastic and inelastic electron scattering from $^{50,52,54}\text{Cr}$. *Phys. Rev. C*, 27:113–132, Jan 1983.

- [80] J. Bellicard, P. Barreau, and D. Blum. Study of chromium-52 by inelastic electron scattering. *Nuclear Physics*, 60(2):319–336, nov 1964.
- [81] Phan-Xuan-Ho, J. Bellicard, P. Leconte, and I. Sick. Inelastic electron scattering from even single-closed-shell nuclei. *Nuclear Physics A*, 210(1):189–210, aug 1973.
- [82] V. M. Khvastunov, N. G. Afanasyev, V. D. Afanasyev, I. S. Gulkarov, A. S. Omelaenko, G. A. Savitsky, A. A. Khomich, N. G. Shevchenko, V. S. Romanov, and N. V. Rusanova. Elastic electron scattering on 58, 60, 64Ni and 112, 118Sn isotopes. *Nuclear Physics A*, 146(1):15–25, may 1970.
- [83] R. Klein, P. Grabmayr, Y. Kawazoe, G. J. Wagner, J. Friedrich, and N. Voegler. Distribution of electric multipole strengths in 58Ni. *Il Nuovo Cimento A (1965-1970)*, 76(2):369–376, 1983.
- [84] B. Frois, S. Turck-Chieze, J. B. Bellicard, M. Huet, P. Leconte, X. H. Phan, I. Sick, J. Heisenberg, M. Girod, K. Kumar, and B. Grammaticos. The effects of triaxial deformations in the structure of the 2(1)+ transition charge density in 58Ni. *Physics Letters B*, 122(5-6):347–350, mar 1983.
- [85] R. Neuhausen, J. W. Lightbody, S. P. Fivozinsky, and S. Penner. Elastic Electron Scattering from Zn Isotopes. *Physical Review C*, 5(1):124–128, jan 1972.
- [86] R. Neuhausen, J. W. Lightbody, S. P. Fivozinsky, and S. Penner. Electron scattering studies of low-lying collective states of even Zn isotopes. *Nuclear Physics A*, 263(2):249–260, jun 1976.
- [87] R. Neuhausen. Transition charge densities of low-lying collective states in even Zn isotopes. *Nuclear Physics A*, 282(1):125–152, may 1977.
- [88] J. P. Bazantay, J. M. Cavedon, and J. C. Clemens. Boson densities in the germanium isotopes and inelastic electron scattering. *Physical Review Letters*, 54(7):643–645, 1985.
- [89] J. Alster, B. F. Gibson, J. S. McCarthy, M. S. Weiss, and R. M. Wright. Elastic Electron Scattering from 88Sr. *Physical Review C*, 7(3):1089–1098, mar 1973.

- [90] R. P. Singhal, S. W. Brain, C. S. Curran, T. E. Drake, W.A. Gillespie, A. Johnston, and E. W. Lees. Elastic scattering of electrons from the $N = 50$ isotones: ^{88}Sr , ^{89}Y , ^{90}Zr and ^{92}Mo . *Nuclear Physics A*, 216(1):29–41, nov 1973.
- [91] S. P. Fivozinsky, S. Penner, J. W. Lightbody, and D. Blum. Electron scattering from ^{88}Sr and ^{89}Y . *Phys. Rev. C*, 9:1533–1542, Apr 1974.
- [92] J. Heisenberg, J. Dawson, T. Milliman, O. Schwentker, J. Lichtenstadt, C. N. Papanicolas, J. Wise, J. S. McCarthy, N Hintz, and H. P. Blok. Excitation of positive-parity states in electron scattering from ^{90}Zr . *Physical Review C*, 29(1):97–108, jan 1984.
- [93] Phan Xuan Ho, J. B. Bellicard, A. Bussiere, P. Leconte, and M. Priou. Elastic electron scattering on ^{90}Zr and ^{92}Mo . *Nuclear Physics, Section A*, 179(2):529–539, 1972.
- [94] R. P. Singhal, S. W. Brain, C. S. Curran, W. A. Gillespie, A. Johnston, E. W. Lees, and A. G. Slight. Inelastic scattering of electrons for ^{90}Zr . *Journal of Physics G: Nuclear Physics*, 1(5):558–578, jun 1975.
- [95] R. P. Singhal, S. W. Brain, W. A. Gillespie, A. Johnston, E. W. Lees, and A. G. Slight. The $B(E2\uparrow)$ and Rtr of $21+$ states in ^{90}Zr and ^{60}Ni . *Nuclear Physics A*, 218(1):189–200, jan 1974.
- [96] J. Bellicard, P. Leconte, T. H. Curtis, R. A. Eisenstein, D. Madsen, and C. Bockelman. The scattering of 60 MeV electrons from ^{90}Zr . *Nuclear Physics A*, 143(1):213–224, mar 1970.
- [97] T. E. Milliman, J. P. Connelly, J. H. Heisenberg, and nd J. E. Wise F. W. Hersman. Electron scattering from ^{92}Mo . *Physical Review C*, 41(6):2586–2604, jun 1990.
- [98] R. G. Arthur, R. P. Singhal, S. W. Brain, W. A. Gillespie, A. Johnston, E. W. Lees, and M. W. S. Macauley. Vibrational states in ^{108}Pd studied by elastic and inelastic electron scattering. *Journal of Physics G: Nuclear Physics*, 4(6):961–972, jun 1978.
- [99] A. J. Singh, P. K. Raina, and S. K. Dhiman. Quadrupole-quadrupole plus pairing interaction application to transition charge density calculations in some even-even palladium nuclei. *Physical Review C*, 50(5):2307–2313, 1994.

- [100] J. B. Van Der Laan, A. J. C. Burghardt, C. W. De Jager, and H. De Vries. Electron scattering off 110Pd, a test of the interacting boson approximation. *Physics Letters B*, 153(3):130–133, mar 1985.
- [101] J. Wesseling, C. W. de Jager, H. de Vries, M. N. Harakeh, R. De Leo, and M. Pignanelli. The interacting boson approximation tested against quadrupole excitations of 110Cd. *Physics Letters B*, 245(3-4):338–342, aug 1990.
- [102] T. H. Curtis, R. A. Eisenstein, D. W. Madsen, and C. K. Bockelman. Quadrupole and octupole excitations of the even tin isotopes by electron scattering. *Phys. Rev.*, 184:1162–1177, Aug 1969.
- [103] R. K. J. Sandor, H. P. Blok, U. Garg, M. N. Harakeh, C. W. De Jager, V. Yu. Ponomarev, A. I. Vdovin, and H. De Vries. Interplay between single-particle and collective degrees of freedom in the excitation of the low-lying states in 142Nd. *Nuclear Physics A*, 535(3):669–700, 1991.
- [104] D. W. Madsen, L. S. Cardman, J. R. Legg, and C. K. Bockelman. Anomalous electron scattering from 142, 146, 150Nd. *Nuclear Physics A*, 168(1):97–128, jun 1971.
- [105] R. K. J. Sandor, H. P. Blok, M. Girod, M. N. Harakeh, C. W. de Jager, and H. de Vries. Electron-scattering investigation of the low-lying states in 150Nd. *Nuclear Physics A*, 551(3):349–377, jan 1993.
- [106] F. W. Hersman, W. Bertozzi, T. N. Buti, J. M. Finn, C. E. Hyde-Wright, M. V. Hynes, J. Kelly, M. A. Kovash, S. Kowalski, J. Lichtenstadt, R. Lourie, B. Murdock, B. Pugh, F. N. Rad, C. P. Sargent, and J. B. Bellicard. Inelastic electron scattering from collective levels of 154Gd. *Phys Rev C Nucl Phys*, 33(6):1905–1916, jun 1986.
- [107] T. Cooper, W. Bertozzi, J. Heisemberg, S. Kowalski, W. Turchinets, C. Williamson, L. Cardman, S. Fivozinsky, J. Lightbody, and S. Penner. Shapes of deformed nuclei as determined by electron scattering: 152Sm, 154Sm, 166Er, 176Yb, 232Th, and 238U. *Physical Review C*, 13(3):1083–1094, mar 1976.

- [108] W. Boeglin, P. Egelhof, I. Sick, J. M. Cavedon, B. Frois, D. Goutte, V. Mot, P. Leconte, X. H. Phan, S.K. Platchkov, S. Williamson, and M. Girod. Electron scattering from transitional nuclei. *Nuclear Physics A*, 477(3):399–444, feb 1988.
- [109] V. Yu. Ponomarev, W. T. A Borghols, S. A. Fayans, M. N. Harakeh, C. W. de Jager, J. B. van der Laan, A. P. Platonov, H. de Vries, and S. Y. van der Werf. Transition charge densities of low-lying collective states in 196Pt from inelastic electron scattering. *Nuclear Physics A*, 549(2):180–196, nov 1992.
- [110] J. L. Friar and J. W. Negele. The determination of the nuclear charge distribution of 208Pb from elastic electron scattering and muonic X-rays. *Nuclear Physics A*, 212(1):93–137, sep 1973.
- [111] J. B. Bellicard and K. J. van Oostrum. Elastic electron scattering from lead-208 at 175 and 250 mev. *Phys. Rev. Lett.*, 19:242–244, Jul 1967.
- [112] J. Heisenberg, J. Lichtenstadt, C. N. Papanicolas, and J. S. McCarthy. Excitation of low lying natural parity levels in 208 Pb by inelastic electron scattering. *Physical Review C*, 25(5):2292–2308, may 1982.
- [113] M. Nagao and Y. Torizuka. Electron excitation of low-lying states in 208Pb. *Physics Letters B*, 37(4):383–385, dec 1971.
- [114] J. Friedrich. Investigation of some low-lying states in 208Pb by inelastic electron scattering. *Nuclear Physics A*, 191(1):118–136, aug 1972.
- [115] S. Goriely, F. Tondeur, and J. M. Pearson. A Hartree–Fock Nuclear Mass Table. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 77(2):311–381, mar 2001.
- [116] D. F. Morales Botero, L. C. Chamon, and B. V. Carlson. Transition densities in the context of the generalized rotation-vibration model. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 44(10):105102, 2017.
- [117] N. Keeley, J. S. Lilley, and J. A. Christley. Effective polarization potentials as a tool for probing near-barrier reaction mechanisms. *Nuclear Physics A*, 603(1):97–116, 1996.

- [118] L. C. Chamon, L. R. Gasques, and B. V. Carlson. Approximate treatment of relativistic effects in the low-energy $\alpha + \alpha$ scattering. *Phys. Rev. C*, 84:044607, Oct 2011.
- [119] L. C. Chamon, L. R. Gasques, G. P. A. Nobre, E. S. Rossi Jr., R. J. DeBoer, C. Seymour, M. Wiescher, and G. G. Kiss. Evidence of a slight nuclear transparency in the alpha-nucleus systems. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics*, 42(5):055102, may 2015.
- [120] L. West, K. W. Kemper, and N. R. Fletcher. Elastic scattering of ^{16}O by even mass nickel isotopes. *Phys. Rev. C*, 11:859–868, Mar 1975.
- [121] H. Esbensen and F. Videbaek. Coupled-channels calculations of elastic and inelastic scattering. *Physical Review C*, 40(1):126–131, jul 1989.
- [122] L. C. Chamon, D. Pereira, E. S. Rossi, C. P. Silva, H. Dias, L. Losano, and C. A. P. Ceneviva. Isotopic dependence of the ion-ion potential in the systems $^{16}\text{O}+^{58,60,62,64}\text{Ni}$. *Nuclear Physics A*, 597(2):253–268, jan 1996.
- [123] L. West and N. R. Fletcher. Inelastic scattering of ^{16}O by even mass nickel isotopes. *Phys. Rev. C*, 15:2052–2058, Jun 1977.
- [124] J. J. S. Alves, P. R. S. Gomes, J. Lubian, L. C. Chamon, D. Pereira, R. M. Anjos, E. S. Rossi, C. P. Silva, M. A. G. Alvarez, G. P. A. Nobre, and L. R. Gasques. Consistent analysis of peripheral reaction channels and fusion for the $^{16,18}\text{O} + ^{58}\text{Ni}$ systems. *Nuclear Physics A*, 748(1-2):59–74, 2005.
- [125] N. Keeley, J. S. Lilley, J. X. Wei, M. Dasgupta, D. J. Hinde, J. R. Leigh, J. C. Mein, C. R. Morton, H. Timmers, and N. Rowley. Fusion excitation function measurements for the $^{16}\text{O}+^{58}\text{Ni}$ and $^{16}\text{O}+^{62}\text{Ni}$ systems. *Nuclear Physics A*, 628(1):1–16, jan 1998.
- [126] B. V. Carlson, L. C. Chamon, and L. R. Gasques. Accurate approximation for the coulomb potential between deformed nuclei. *Physical Review C*, 70(5):057602, nov 2004.
- [127] N. F. Mott, H. S. W. Massey, and H. S. W. Massey. *The Theory of Atomic Collisions*. The International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 1965.

- [128] H. Feshbach. The Coulomb Scattering of Relativistic Electrons and Positrons by Nuclei. *Physical Review*, 88(2):295–297, oct 1952.
- [129] R. H. Dalitz. On Higher Born Approximations in Potential Scattering. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 206(1087):509–520, may 1951.
- [130] J. Raynal. Optical-model and coupled-channel calculations in nuclear physics. In *Computing as a language of physics*, page 281. IAEA, Vienna, 1972.
- [131] V. Numerov. *Monthly Notices Roy. Astr. Soc.*, (84):592, 1924r.
- [132] M. A. Melkanoff, T. Sawada, and J. Raynal. *Methods in computational physics*, volume 6. Academic Press, New York, 1966.
- [133] J. Raynal. Equations couplées et d.w.b.a. In *Sur quelques Méthodes de Physique Nucléaire Théorique*, page 179. Institut de Physique Nucléaire de Lyon, Report LYCEN, 6804, Aussois, 1968.
- [134] J. Raynal. Recurrence relations for distorted-wave born approximation coulomb excitation integrals and their use in coupled channel calculations. *Phys. Rev. C*, 23:2571–2585, Jun 1981.
- [135] P. Descouvemont and D. Baye. The r -matrix theory. *Reports on Progress in Physics*, 73(3):036301, 2010.
- [136] D. Baye. The lagrange-mesh method. *Physics Reports*, 565:1–107, 2015.
- [137] P. Descouvemont. An r-matrix package for coupled-channel problems in nuclear physics. *Computer Physics Communications*, 200(Supplement C):199–219, 2016.