Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Simetrias dinâmicas e energias de ligação de núcleos com $N = Z$

Ettore Baldini Neto

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Celso Luiz Lima - orientador- (*IFUSP*)

Prof. Dr. José Antônio Castilho Alcarás (*IFT/UNESP*)

Prof. Dr. Brett Vern Carlson (*ITA/CTA*)

Profa. Dra Alinka Lépine-Szily (*IFUSP*)

Prof. Dr. Emerson J.V. Passos (*IFUSP*)

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3617
ex. 1

Tese de doutorado
submetida ao Instituto
de Física da Universidade
de São Paulo.

Grupo de Física Nuclear Teórica e Fenomenologia de Partículas Elementares

- FINPE -

São Paulo

2001

Prof. Armando Corbani Ferraz
Presidente da Comissão de Pós Graduação

def. 20/12/01

539.74

E177.1

D

ex. 1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Baldini Neto, Ettore

Simetrias dinâmicas e energias de ligação de núcleos
com $N=Z$. São Paulo 2001.

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

Orientador: Prof. Dr. Celso Luiz Lima
Área de Concentração: Física Nuclear

Unitermos: 1. Estrutura nuclear; 2. Energias de ligação;
3. Modelos algébricos; 4. Isospin

USP/IF/SBI-02/2002

Aos meus pais Fernando e D. Téia, sem
os quais nada disso teria sido possível,
com todo o meu amor!!

Agradecimentos:

- Ao meu orientador Dr. Celso Luiz Lima, pela liberdade e confiança depositada, por tudo o que aprendi com ele, pela amizade, pelo entusiasmo e, por ser um espelho de comportamento ético e moral. Com toda a minha admiração!
- I would like to thank Dr. Pieter Van Isacker for all the attention, availability and mainly for his patience and kindness.
- Um agradecimento especial ao meu assessor anônimo da FAPESP, pelos comentários sempre relevantes ao desenvolvimento deste projeto.
- Às grandes famílias Baldini e Luchesi por todo o amor dispensado: Tia Alzira, Tio Bruno (in memoriam), Nena e Odair, Renato e Lena, Cilene, Fernanda, Vinicuis, Sandra, Sílvia, Bruno, Alexandre e Samuel; Tia Berenice e Tio Dito (in memoriam) e Renê. Com todo o meu amor e carinho!
- Aos meus grandes amigos Jackson Max Furtunato Maia (e claro Carenina, Ariel e Amanda), Emílio Carlos de Muno, Marcel Barbosa Dupret, Mara Maso Varela e claro pra Elô, acima de tudo pela grande amizade, pelo divã, pela ajuda com a tese, papos, cinemas, carinho e neuroses compartilhadas e levadas sempre com muito bom humor!
- Aos velhos amigos: Mara Senghi Soares, José Henrique Spahn Torres e Alexandre Lima Correia.
- Aos colegas e demais professores do FINPE por toda a ajuda e pela ótima convivência durante estes anos.
- Aos amigos, integrantes e público, da banda Rosencrantz and Guildenstern Estão Vivos...Será? pelas horas agradáveis de música e diversão, baladas e amizade. São eles: Fábio Coral Fonseca, Meco Conti, Gisele Wunder, Denis Cardoso, Daniel Zanetti de Flório, Verônica Melo e Alexandre Leite Gadelha.

- Meus mais sinceros agradecimentos e carinho à Dra. Daisy Hirata, ao Dr. Antonio Carlos Villari, à Zilah e às gêmeas Júlia e Paula pela amizade e pela calorosa recepção em Caen, terra tão fria e chuvosa.
- Je voudrais remercier a tous mes amis du GANIL: Sylvie Hudan, Olivier Monnaye, Jean-Luc Lecouey, Jacques Normand, Carmen Escaño Rodriguez, Pierre Chau, Bertran Bouriquet, Alexis Mignon, Stéphane Basnary et Stéphan Gibouin. Salut a tous!! Et aussi, Madame Armelle Latour et Mr. Michel Lyon pour m'aider au laboratoire.
- Aos funcionários e funcionárias que mantiveram as estruturas necessárias para um bom andamento do trabalho e, em particular, à Rosana Baptista Gimenes Biz, que várias vezes me salvou das ameaças da selva burocrática.
- À parcela dos cidadãos que paga seus impostos esperando um país melhor que tarda em vir.
- À Fapesp pelo apoio financeiro e estrutura que foram fundamentais ao bom andamento deste projeto.

Resumo

Neste trabalho é apresentado um modelo algébrico para o cálculo de energias de ligação de núcleos pesados com $N = Z$ baseado nas versões invariantes por isospin do Modelo de Bósons Interatuantes (IBM).

Com a utilização de uma interação adequada para a descrição dos modos isoescalar e isotetorial do emparelhamento nuclear adicionada àquelas interações que descrevem globalmente uma dada região de massa, foram ajustados os parâmetros da hamiltoniana e calculados núcleos com $N = Z$ ao longo das camadas sd e pf . Deste modo, pôde-se fazer algumas previsões, para suas massas do estado fundamental e para estados excitados, que oferecem um desafio às novas gerações de feixes radiativos que estão por vir.

•

Abstract

In this work we present an algebraic model for calculating the binding energies of heavy nuclei with the same number of protons and neutrons which is based in the isospin invariant versions of the Interacting Boson Model (IBM).

With an adequate interaction for the description of the isoscalar and isovector pairing modes of the residual nuclear interaction added to those terms responsible for the bulk properties of a given mass region, we have fitted the parameters of our algebraic hamiltonian and have calculated nuclei with $N = Z$ along the sd and pf shells. Therefore we were able to make some predictions, for their ground state masses as well as for the excited states, which offer a challenge to the new generations of radioactive nuclear beams.

Conteúdo

Agradecimentos	v
Resumo	vii
Abstract	ix
1 Simetrias e teoria de grupos	5
1.1 Introdução	5
1.2 A simetria de isospin: Os grupos $U(2)$ e $SU(2)$	7
1.3 Aspectos formais da teoria de grupos	9
1.3.1 Definições	10
1.3.2 Invariantes de Casimir e constantes do movimento	13
1.3.3 Representações e autofunções	14
1.3.4 Algumas representações tensoriais de grupos de Lie	17
1.3.5 Simetrias dinâmicas e o método algébrico	19
1.4 Resumo	21
2 O modelo de bósons interatuantes	23
2.1 Introdução	23
2.2 O IBM-1	25
2.2.1 Operadores bosônicos	26
2.2.2 A hamiltoniana do IBM-1	27
2.2.3 Operadores de transição eletromagnética e de transferência de pares	28

2.2.4	Álgebras e sub-álgebras bosônicas	29
2.2.5	O limite vibracional	32
2.2.6	O limite rotacional	35
2.2.7	O limite gama-instável	37
2.3	Simetrias dinâmicas	38
2.3.1	Operadores ou invariantes de Casimir	38
2.3.2	Limite vibracional ($U(5)$)	39
2.3.3	Limite rotacional ($SU(3)$)	40
2.3.4	Limite gama-instável ($SO(6)$)	45
2.4	O IBM-2	47
2.4.1	Truncando o modelo de camadas	47
2.4.2	Bósons a partir de férmions	49
2.4.3	Mapeando os operadores	51
2.5	A hamiltoniana do IBM-2	52
2.5.1	A simetria de F-spin	54
2.5.2	Álgebras bosônicas	56
2.5.3	Bases para sistemas acoplados, base de F-Spin e simetrias dinâmicas do IBM-2	57
2.6	Resumo	60
3	Versões invariantes em isospin	61
3.1	Introdução	61
3.2	O IBM-3	62
3.2.1	Álgebras bosônicas	63
3.3	A simetria de $SU(4)$	66
3.3.1	Considerações sobre a simetria de $SU(4)$ e energias de ligação.	68
3.4	O IBM-4	71
3.4.1	Algumas simetrias dinâmicas do IBM-4	74

3.5	Resumo	76
4	Um modelo algébrico para núcleos com $N = Z$	77
4.1	Introdução	77
4.2	Dois modelos para o cálculo de massas nucleares	78
4.2.1	O modelo de gota líquida melhorado	78
4.2.2	A aproximação de Thomas-Fermi	80
4.3	Uma fórmula de massa para os estados com $T = 0$ e $T = 1$ para núcleos com $N = Z$	82
4.4	A hamiltoniana algébrica	87
4.5	A camada sd	90
4.6	A camada pf	93
4.7	Resumo	101
	Comentários Finais e perspectivas	103
A	Apêndice A	105
A.1	Produto Externo através das Tabelas de Young	105
A.2	Grupos de Lie	106
A.3	Cálculo dos elementos de matriz do $C_2[SU_{ST}(4)]$ na base simétrica	108
A.4	A influência do potencial de spin-órbita nas correlações superfluidas de sistemas com $N = Z$	111
	Referências	113

Lista de Figuras

2.1	Representação pictórica dos três limites do IBM-1.	31
2.2	Espectros do limite vibracional do IBM-1 para $N = 6$ bósons. Os números quânticos (ν, n_Δ) são mostrados juntamente com o momento angular e a paridade para cada grupo de estados.	34
2.3	Regiões da Tabela Periódica onde ocorrem as simetrias dinâmicas do IBM: (I) corresponde a $U(5)$, (II) a $SU(3)$ e (III) a $SO(6)$	39
2.4	Espectro do ^{110}Cd [29] com $N = 7$ bósons. Os parâmetros utilizados foram $\varepsilon' = 0,722$ MeV, $c_0 = 0,029$ MeV, $c_2 = -0,042$ MeV e $c_4 = 0,098$ MeV	42
2.5	Espectro do ^{156}Gd , com $N = 12$ bósons. Os parâmetros utilizados foram $\delta = -0,0210$ MeV e $\gamma = 0,0038$ MeV [29].	43
2.6	Espectro do ^{196}Pt , com $N = 6$ bósons. Os parâmetros utilizados foram $A = 0,171$ MeV e $B = 0,3$ MeV e $C = 0,01$ MeV.	45
2.7	Elementos de matriz para a camada $1g_{9/2}$ de acordo com um cálculo do modelo de camadas. Note que os estados favorecidos são aqueles com $L = 0$ e $L = 2$. . .	48
2.8	Espectro com a simetria $U_{\pi+\nu}(6) \supset U_{\pi+\nu}(5)$ com $N_\pi = 2$ e $N_\nu = 1$	59
2.9	Espectro com a simetria $U_{\pi+\nu}(6) \supset SU_{\pi+\nu}(3)$ com $N_\pi = 2$ e $N_\nu = 1$	60
3.1	Representação das diferenças duplas de energias de ligação. Caso (a) Núcleos par-pares da camada sd . Caso (b) Predições do modelo de Wigner	70

4.1	Quebra de degenerescência entre os pares com $T = 0$ e $T = 1$ no caso de $N = 1$ e $N = 2$ respectivamente. Observe que para $x = 0$ em ambos os casos, estes estados estão degenerados e, quando a interação $\hat{C}_1[U_S(3)]$ é ligada, ocorre a quebra da degenerescência.	86
4.2	Diferenças $E(T = 1) - E(T = 0)$ na camada sd	93
4.3	Parte baixa dos espectros de núcleos ímpar-ímpares com $N = Z$ (em sequência, para cada grupo de estados: ^{58}Cu , ^{62}Ga , ^{66}As , ^{70}Br , ^{74}Rb e ^{78}Y) para a primeira metade da camada pf . Estão indicados por 3^+ e 3 os primeiros estados excitados dos núcleos ^{70}Br e ^{74}Rb com $(J, T) = (3^+, 0)$ e $(J, T) = (3, 0)$ medidos experimentalmente.	97
4.4	Diferenças de energia entre os estados com $T = 1$ e $T = 0$ para toda a camada pf comparados com os dados experimentais (quando disponíveis e com a fórmula empírica da referência [65].	99
4.5	Comparação das diferenças ΔE_{10} entre os cálculos com o IBM-4 completo e aqueles efetuados neste trabalho (IBM-4 ($L = 0$)). Mostram-se também os dados experimentais.	101
A.1	Produto externo das irreps $[21] \otimes [20]$ de $U(n)$	106

Lista de Tabelas

2.1	Parte do espectro do $^{110}_{48}\text{Cd}_{62}$	41
2.2	Espectro do $^{156}_{64}\text{Gd}_{92}$	44
2.3	Espectro da $^{196}_{78}\text{Pt}_{118}$	46
3.1	Classificação para os estados bosônicos do IBM-3, em seus estados de spin e isospin.	64
3.2	Classificação em isospin-spin para os estados bosônicos do IBM-4 para até 3 bósons	73
3.3	Geradores dos subgrupos de $U(36)$	76
4.1	Parâmetros ajustados para ambas as metades da camada sd , nomeadamente $sd - I$ e $sd - II$	90
4.2	Energias de ligação para núcleos com $N = Z$ da primeira metade da camada sd ajustadas com os parâmetros $sd - I$ da (4.1). O rms foi de 0,8759 MeV. δE são as diferenças entre os valores experimental e teórico.	91
4.3	Energias de ligação para os núcleos com $N = Z$ da segunda metade da camada sd ajustadas com os parâmetros $sd - II$ da tabela (4.1). O rms calculado foi de 0,2452 MeV. δE são as diferenças entre os valores experimental e teórico.	92

4.4	Energias de ligação experimentais, com correção coulombiana, para os núcleos com $N = Z$ da primeira metade da camada pf utilizados no ajuste dos parâmetros da hamiltoniana nuclear. Mostra-se também o isospin do estado fundamental assim como as diferenças de energias entre os estados com $T = 1$ e $T = 0$, ΔE_{10} e as referências de onde foram extraídos os dados (massas e estados excitados respectivamente). Deve-se notar que para o ^{70}Br o estado excitado tem momento angular $J^\pi = 3^+$	94
4.5	Parâmetros ajustados para ambas metades da camada pf , nomeadamente $pf - I$ e $pf - II$	95
4.6	Energias de ligação para núcleos com $N = Z$ da primeira metade da camada pf calculadas com os parâmetros $pf - I$ da tabela (4.5). O rms , foi de 0,3962 MeV. O símbolo * indica que a massa do núcleo ^{70}Br é uma extrapolação [62]. Novamente δE são as diferenças entre os valores experimental e teórico.	96
4.7	Energias de ligação experimentais para os núcleos com $N = Z$ da segunda metade da camada pf , corrigidas por Coulomb, utilizadas no ajuste dos parâmetros da hamiltoniana nuclear. Mostra-se também o isospin do estado fundamental T , assim como as diferenças de energias ΔE_{10} . As asterísticos (*) indicam que os valores utilizados são extrapolações extraídas da referência [62].	98
4.8	Energias de ligação para núcleos com $N = Z$ da segunda metade da camada pf . O rms , foi de 0,41 MeV. Mais uma vez δE é a diferença entre os valores experimental e teórico.	100
A.1	Número de geradores para os principais grupos de Lie.	107
A.2	Número de inteiros que rotulam as representações tensoriais dos grupos de Lie.	108
A.3	Autovalores dos principais operadores de Casimir de grupos de Lie.	108

Introdução

Muitos processos nucleares importantes tanto no Big Bang como na nucleossíntese envolvem núcleos que se encontram fora do vale de estabilidade. Em outras palavras, tais sistemas, ao invés de sofrerem decaimento- β como os núcleos estáveis, sofrem decaimento por emissão de prótons ou nêutrons. As reações nucleares relevantes para o Big Bang envolvem predominantemente sistemas estáveis ou aqueles ricos em nêutrons. Por sua vez, processos em estrelas, envolvem sistemas radioativos e ocorrem em ambientes de altas temperaturas, ricos em prótons.

Núcleos com o mesmo número de prótons e nêutrons desempenham um papel fundamental na astrofísica nuclear. Já no Big Bang, o ${}^4\text{He}$, com dois prótons e dois nêutrons, foi o produto mais abundante da nucleossíntese. Ainda hoje, outro processo que ocorre é a fusão do hidrogênio em ${}^4\text{He}$ que ocorre no centro de estrelas como o sol, por exemplo. Durante os últimos estágios da evolução estelar, núcleos mais pesados com $N = Z$ tornam-se importantes pois são muitas vezes formados pela fusão gradativa do ${}^4\text{He}$. Tais processos ocorrem no centro de estrelas massivas e são produzidos ao longo da linha de $N = Z$ envolvendo o ${}^{12}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{24}\text{Mg}$, ${}^{28}\text{Si}$ e ${}^{56}\text{Ni}$ devido, principalmente, à razão próton-nêutron não ser dramaticamente alterada por processos fracos e também porque, nos processos de fusão, a emissão de um único núcleon não é energeticamente favorecida em relação à emissão de partículas α , preservando deste modo a estrutura dos sistemas com o mesmo número de prótons e nêutrons.

Os núcleos com $N = Z$ mais pesados, na região entre o ${}^{56}\text{Ni}$ e o ${}^{100}\text{Sn}$, são importantes durante a queima do hidrogênio na superfície de estrelas de nêutrons participantes de sistemas binários, que emitem na região dos raios-X, e são sujeitas a acreção de massa. O que torna estes

núcleos tão especiais é o fato de que, nesta região de massa, a linha de $N = Z$ para Z ímpar coincide com a linha de gotejamento dos prótons e, portanto, está no caminho dos processos rp (*rapid proton capture processes*). Para uma revisão e contextualização mais aprofundada sobre os processos- rp em física nuclear o leitor deve consultar as referências [1] e [2].

Dentro do contexto de estrelas de nêutrons em binárias que emitem na região dos raios-X, a compreensão de processos nucleares e o papel de sistemas com $N = Z$ são importantes pelos três motivos listados a seguir:

- As seqüências de reações geram a energia para a curva de emissão de raios-X (**X-ray burst**). Enquanto a maioria das propriedades destas curvas são compreendidas, existem algumas características tais como intervalos de emissão curtos, oscilações quase-periódicas e grandes variações nas escalas temporais de emissão que ainda não têm uma explicação satisfatória.
- Muito do material queimado permanece na superfície das estrelas de nêutrons sendo comprimido pela matéria acrescida que gradualmente substitui a crosta original [3]. Logo, a queima nuclear determina a composição desta crosta com implicações em propriedades térmicas, elétricas e mecânicas. Estes tópicos estão relacionados com assuntos importantes em astrofísica como: a emissão de ondas gravitacionais a partir de estrelas de nêutrons que giram rapidamente e têm a crosta deformada [4]; a possibilidade de se distinguir transientes de buracos negros daqueles de estrelas de nêutrons [5]; a evolução dos campos magnéticos.
- Se uma pequena fração de material escapa ao intenso campo gravitacional de uma estrela de nêutrons, emissões de raios-X podem ter algum papel na nucleossíntese galáctica de alguns núcleos leves [6].

Com o progresso experimental alcançado nos últimos anos tem sido possível medir as propriedades de núcleos mais pesados ricos em prótons em volta do ^{56}Ni , além de se determinar qual seu papel nos processos- rp . Dentre os dados mais relevantes, encontram-se aqueles relaci-

onados com as taxas de decaimento β de núcleos $N = Z$ pares, que são chamados de **pontos de espera** pois seus tempos de vida são longos. Notadamente, o ^{64}Ge , ^{68}Se e ^{72}Kr , acabam impondo um atraso nos processos- rp . No que concerne à estrutura da linha de gotejamento dos prótons, tais sistemas até o ^{96}Cd continuam sendo pontos de espera com a ressalva de que, à medida em que a estabilidade vai se esvaindo na linha de $N = Z$, os tempos de vida destes sistemas ficam cada vez menores. Cálculos baseados em propriedades nucleares recentes indicam que a presença de processos- rp presentes na emissão de raios-X pode ir além do ^{56}Ni e mais ainda, além da região Ge-Kr, ambas tendo sido até agora apontadas como pontos finais de tais processos.

No caso específico dos processos- rp , necessita-se experimentalmente de valores precisos para as energias de separação de um próton S_p para núcleos ímpares junto à linha de gotejamento de prótons [6] pois, usualmente, os tempos de vida dos núcleos que são pontos de espera dependem exponencialmente desta energia. A precisão desejada é de $kT \approx 100$ KeV. Portanto, medidas de massa de núcleos com $N = Z$ pares e de seus equivalentes com $Z = N + 1$ são importantes. Isto se aplica, especialmente aos sistemas com $N = Z$ onde medidas de massas precisas e cálculos com modelos de massas globais são complicadas devido ao termo de Wigner que é o responsável pela energia de ligação extra de tais núcleos devido à superposição das funções de onda dos prótons e nêutrons. Nos modelos de massa correntes, o termo de Wigner é parametrizado com dados de núcleos leves $N = Z$ ou simplesmente não é levado em conta conforme será discutido no Capítulo 4. Além disso, a investigação desses sistemas pesados com $N = Z$ apresenta-se como um desafio para aqueles que trabalham com modelos nucleares, pois é importante apresentar novas propostas para a investigação dos limites dos modelos existentes para esta região da tabela de nuclídeos.

Este trabalho apresenta um modelo algébrico invariante em isospin para o cálculo das energias de ligação de núcleos pesados com $N = Z$ onde o termo de Wigner surge naturalmente de sua estrutura algébrica. Neste caso, tudo o que se faz é ajustar os parâmetros da hamiltoniana nuclear para cada região de massa partindo-se a seguir para extrapolações em núcleos

que ainda não foram medidos da mesma região. O modelo utiliza uma interação que quebra a degenerescência entre os modos isoescalar e isovetorial do emparelhamento nuclear, deste modo a simetria de $SU(4)$, responsável pela degenerescência aparece também de maneira natural. De antemão pode-se dizer que uma vantagem do modelo aqui apresentado consiste no fato de serem utilizados poucos parâmetros em comparação com os modelos correntes na literatura.

No Capítulo 1 faz-se uma pequena revisão de teoria de grupos com a apresentação de conceitos que são utilizados durante todo o trabalho. Já no segundo capítulo, discute-se o Modelo de Bósons Interatuantes (IBM) que é o modelo no qual este trabalho é fortemente baseado. Apresenta-se a abordagem algébrica do IBM na primeira parte do capítulo através da apresentação de operadores, simetrias dinâmicas e exemplos ao longo da tabela de núclídeos, enquanto na segunda parte discute-se um pouco sobre sua microscopia e a conexão com o modelo de camadas. No Capítulo 3 parte-se para as versões invariantes em isospin do IBM e discute-se também a importante simetria $SU(4)$ em física nuclear. Prepara-se, desta maneira, o terreno para a apresentação de nosso modelo no capítulo quatro, onde se apresenta antes duas abordagens diferentes para o cálculo de energias de ligação nucleares. São mostrados os resultados e conclusões para as camadas sd e pf . Nesta última camada existem poucos dados experimentais disponíveis e a importância do trabalho fica ressaltada na medida em que aponta uma direção para os valores das energias de ligação de sistemas que não foram ainda produzidos. Finalmente no Apêndice A são colocados tópicos que são necessários e complementares para um bom acompanhamento do texto.

Capítulo 1

Simetrias e teoria de grupos

1.1 Introdução

A utilização de métodos que envolvem teoria de grupos para a análise de sistemas físicos regidos pela mecânica quântica tem se mostrado de imensa utilidade tanto na interpretação da natureza destes, quanto na simplificação dos cálculos que lhes são pertinentes. Pode-se aplicar a teoria de grupos desde em casos que tais sistemas tenham alguma simetria relacionada à sua geometria, como em física molecular, até em teorias onde as simetrias internas ou de *gauge* sejam usadas, como em física de partículas e teorias de campo. Em ambas as situações, o que se faz é explorar as características de um dado sistema que resultam de uma simetria intrínseca e da estrutura de grupos a ela associada. Em geral, simetrias levam a invariâncias, que, por sua vez, determinam leis de conservação. Em mecânica quântica tem-se o estabelecimento de números quânticos que *rotulam* as funções de onda e são responsáveis por regras de seleção para transições e processos que envolvam reações nucleares, por exemplo. Mesmo quando uma dada simetria é quebrada, as interações podem ser decompostas em uma soma sobre operadores tensoriais com propriedades bem definidas sob as transformações desta simetria, permitindo que o formalismo da teoria de grupos possa ser utilizado para o cálculo dos elementos de matriz destas interações.

A utilização da teoria de grupos em física nuclear tem uma longa história, que começou

com os trabalhos de Wigner e a utilização do grupo $U(4)$ na descrição invariante em spin-isospin de núcleos leves [7]. Desde então, muitas abordagens surgiram, dentre as quais pode-se citar os trabalhos de Racah [8] na classificação de espectros complexos e os de Elliot [9] sobre as propriedades rotacionais dos núcleos e suas conexões com a álgebra do grupo $SU(3)$. Nos anos 70, o interesse por técnicas algébricas aumentou com o surgimento de um novo modelo de estrutura nuclear chamado de *modelo de bósons interatuantes* ou IBM, cujo objetivo inicial era descrever as propriedades de núcleos par-par, isto é, sistemas onde o número de núcleons de valência é par e, além disso, não é feita a distinção entre estas partículas. Mais tarde, outras versões deste modelo foram desenvolvidas, e atualmente sua aplicabilidade estende-se até aqueles núcleos ímpar-ímpares e também para os sistemas de massa ímpar. Os constituintes fundamentais do IBM, em sua primeira versão, que é usualmente conhecida como IBM-1, são bósons com momento angular 0 (bósons *s*) e com momento angular 2 (bósons *d*), sendo o seu número igual ao número de núcleons de valência em um dado núcleo par-par. A escolha destes bósons está associada respectivamente às partes monopolar e quadrupolar da interação de emparelhamento entre partículas idênticas. Por sua vez, núcleos ímpares são tratados através da inclusão explícita de operadores fermiônicos para os núcleons que ocupam orbitais específicos do modelo de camadas, gerando assim, um sistema de bósons interatuantes e férmions. Aqui, tais sistemas não serão estudados, mas existem inúmeras referências que tratam do assunto, como por exemplo [10].

Neste capítulo, serão introduzidas na primeira seção, através da simetria de isospin, alguns conceitos de teoria de grupos que serão utilizados durante todo o texto. Nas seções subsequentes dar-se-á atenção a alguns formalismos relacionados com o tópico, dando-se maior atenção aos grupos ortogonais e unitários. Finalmente, será apresentada a estratégia utilizada no tratamento do problema proposto neste trabalho. No Apêndice A, no final deste trabalho, será apresentada a descrição de alguns grupos contínuos relevantes.

1.2 A simetria de isospin: Os grupos $U(2)$ e $SU(2)$

A abordagem aqui apresentada segue, basicamente, as idéias contidas na referência [11].

Considere o espaço bi-dimensional gerado por dois estados. Um designando um próton e o outro um nêutron conforme abaixo:

$$\begin{aligned} |p\rangle &= a_p^\dagger |0\rangle \\ |n\rangle &= a_n^\dagger |0\rangle, \end{aligned} \tag{1.1}$$

com $a_p^\dagger$ ($a_n^\dagger$) representando o operador de criação de um próton (nêutron).

O estado mais geral deste espaço pode ser escrito como

$$|\Psi\rangle = \langle p|\Psi\rangle |p\rangle + \langle n|\Psi\rangle |n\rangle. \tag{1.2}$$

Aplicando uma transformação unitária, $U^\dagger = U^{-1}$, sobre (1.2), por exemplo uma rotação, tem-se que $\Psi' = U_R \Psi$. A norma deste estado é preservada estando (1.2) em uma dada orientação. Duas rotações podem trazê-lo de volta à posição original. Esta é a propriedade essencial que define um grupo de transformações e, neste caso, formam o grupo de transformações unitárias em duas dimensões, chamado de $U(2)$. Os vetores (1.1) constituem uma base para a representação fundamental do grupo $U(2)$. Deve-se lembrar que o grupo $U(2)$, como todos os outros, tem uma estrutura matemática de transformações bem definida e pode-se dizer que o fato do grupo representar uma situação física como o isospin de prótons e de nêutrons é “acidental”. Um determinado ambiente em que um grupo é representado é chamado de **realização** deste grupo.

Considere agora os operadores $a_p^\dagger$ e $a_n^\dagger$ e seus respectivos operadores de aniquilação a_p e a_n . Quando se quer construir estados de muitos núcleons, o princípio de Pauli restringe as possibilidades àqueles estados antissimétricos, obedecendo estes operadores a regras de anticomutação:

$$\begin{aligned} \{a_i^\dagger, a_j\} &= \delta_{ij} \\ \{a_i^\dagger, a_i^\dagger\} &= 0 \\ \{a_i, a_i\} &= 0 \end{aligned} \tag{1.3}$$

com $i, j = p, n$.

Formando-se combinações bilineares (que conservam o número de partícula) destes operadores tem-se o conjunto

$$a_p^\dagger a_p, a_p^\dagger a_n, a_n^\dagger a_p, a_n^\dagger a_n, \quad (1.4)$$

que é linearmente independente e, quando as relações de comutação entre eles são calculadas, o resultado é uma combinação linear dos operadores que constituem o comutador, como mostrado abaixo:

$$\begin{aligned} [a_p^\dagger a_p, a_p^\dagger a_n] &= a_p^\dagger a_n, \\ [a_p^\dagger a_p, a_n^\dagger a_p] &= -a_n^\dagger a_p, \\ [a_p^\dagger a_p, a_n^\dagger a_n] &= 0, \\ [a_p^\dagger a_n, a_n^\dagger a_p] &= a_p^\dagger a_p - a_n^\dagger a_n, \\ [a_p^\dagger a_n, a_n^\dagger a_n] &= a_p^\dagger a_n, \\ [a_n^\dagger a_p, a_n^\dagger a_n] &= -a_n^\dagger a_p. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Pode-se dizer, deste modo, que os quatro operadores *fecham* sob comutação e geram a álgebra $u(2)$. O grupo de transformações mencionadas anteriormente é chamado de **grupo de Lie** $U(2)$, enquanto que os operadores (1.4) são ditos **geradores** deste grupo. Para tornar mais clara a discussão, são definidos os seguintes operadores em termos daqueles da equação (1.4):

$$\begin{aligned} \hat{T}_+ &\equiv \hat{T}_x + i\hat{T}_y \equiv a_p^\dagger a_n, \\ \hat{T}_- &\equiv \hat{T}_x - i\hat{T}_y \equiv a_n^\dagger a_p, \\ \hat{T}_z &\equiv \frac{1}{2}(a_p^\dagger a_p - a_n^\dagger a_n), \\ \hat{N} &\equiv a_p^\dagger a_p + a_n^\dagger a_n. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Tem-se, desta feita, dois conjuntos de operadores linearmente independentes. O primeiro é constituído por $\hat{T}_+$, $\hat{T}_-$, $\hat{T}_z$ e $\hat{N}$, enquanto o segundo é formado por: $\hat{T}_i$, com $i = x, y, z$ e $\hat{N}$. Calculando os comutadores para o segundo conjunto através da utilização das equações (1.5)

mostra-se que:

$$\begin{aligned} [\hat{T}_i, \hat{T}_j] &= i\varepsilon_{ijk}\hat{T}_k, \\ [\hat{N}, \hat{T}_i] &= 0. \end{aligned} \tag{1.7}$$

As primeiras relações de comutação são idênticas àsquelas dos operadores do momento angular, e reside aí a semelhança entre as álgebras destas duas quantidades físicas. Os operadores $\hat{T}_i$ e $\hat{N}$ são, também, geradores do grupo $U(2)$, do mesmo modo que $\hat{T}_+$, $\hat{T}_-$, $\hat{T}_z$ e $\hat{N}$. O operador número, $\hat{N}$, comuta com todos os operadores $\hat{T}_i$, e também consigo mesmo, sendo chamado de **operador de Casimir** do grupo $U(2)$. Também os operadores $\hat{T}_i$ fecham sob comutação e formam, por si só, a álgebra de Lie de $SU(2)$. Como os geradores desta álgebra estão contidos no conjunto dos geradores de $U(2)$, diz-se que $SU(2)$ é um subgrupo (ou sub-álgebra) de $U(2)$. Já o operador número forma a sub-álgebra $U(1)$ ficando a relação entre estes grupos dada por

$$U(2) \supset SU(2) \otimes U(1). \tag{1.8}$$

Utilizando a equação (1.7) pode-se mostrar que o operador $\hat{T}^2 = \hat{T}_x^2 + \hat{T}_y^2 + \hat{T}_z^2$ comuta com os operadores $\hat{T}_{x,y,z}$ e, portanto, é o operador de Casimir de segunda ordem de $SU(2)$ e também de $U(2)$ devido à comutação com $\hat{N}$.

Tendo em mente este exemplo simples que introduziu conceitos importantes como o de grupos, geradores e operadores de Casimir, parte-se para a a definição formal dos tópicos apresentados até aqui.

1.3 Aspectos formais da teoria de grupos

Tanto os sistemas físicos clássicos como os quânticos são usualmente bastante complicados. Contudo, o estudo de suas simetrias pode, além de simplificar seu tratamento, indicar ainda a direção correta para uma compreensão mais aprofundada destes sistemas. A exploração de simetrias de um sistema físico também indica qual o caminho correto na elaboração de uma

teoria através do estabelecimento de vínculos, por exemplo, para um problema de outra maneira intratável.

Uma característica fundamental das simetrias e, conseqüentemente, da teoria de grupos é sua universalidade. Isto é, os mesmos princípios são aplicados para uma imensa variedade de sistemas físicos, desde moléculas até partículas elementares. Mais ainda, os mesmos tipos de informações são obtidos, tornando a teoria de grupos um formalismo extremamente útil e atraente. Na maioria das vezes pode-se ter um entendimento intuitivo a respeito das simetrias de um dado sistema, particularmente quando se consegue expressar geometricamente as transformações que o deixam invariante. No entanto, esta maneira de compreender não é muitas vezes suficientemente profunda para se fazer a conexão com a física existente, tornando-se necessária a generalização das noções de transformações de simetria em termos de idéias mais abstratas. Quando estas operações são contínuas, pode-se sempre considerar o caso de transformações infinitesimais e estudar o comportamento de sistemas sujeitos às últimas. A teoria para o estudo de tais transformações foi primeiramente proposta por Marius Sophus Lie [12] que introduziu os conceitos básicos e operações do que se conhece hoje como álgebras de Lie. Estas álgebras serão o assunto das próximas seções devendo o leitor entendê-las como uma espécie de compilação de resultados que são bem estabelecidos.

1.3.1 Definições

Serão apresentados formalmente alguns dos conceitos introduzidos na seção anterior. Existem inúmeras referências a respeito de teoria de grupos que o leitor pode consultar para um aprofundamento no assunto, como por exemplo [13].

Grupos: Um grupo abstrato G é definido por um conjunto de elementos $(G_1, G_2 \dots G_n)$ para os quais existe uma regra de “multiplicação” que os combine e satisfaça as seguintes propriedades:

1. Clausura: Se G_i e G_j são dois elementos do grupo G , também o é o produto $G_i G_j$
2. Associatividade: $G_i(G_j G_k) = (G_i G_j) G_k$

3. Identidade: Existe um elemento E de G que satisfaz:

$$EG_i = G_iE = G_i \quad (1.9)$$

4. Inverso: Para cada elemento G_i existe um elemento G_i^{-1} de tal modo que:

$$G_iG_i^{-1} = G_i^{-1}G_i = E \quad (1.10)$$

O número n de elementos de um grupo é chamado de **ordem**. Nos grupos de Lie, todos os elementos podem ser obtidos pela exponenciação a partir de um conjunto básico de elementos g_i , com $i = 1, 2, \dots, s$, denominados **geradores**, e que constituem a álgebra de Lie associada ao grupo de Lie ¹. Os geradores definem uma álgebra de Lie se eles fecharem sob a operação de comutação, ou seja:

$$[g_i, g_j] = \sum_k c_{ij}^k g_k, \quad (1.11)$$

e também se satisfizerem a identidade de Jacobi²

$$[g_i, [g_j, g_k]] + [g_k, [g_i, g_j]] + [g_j, [g_k, g_i]] = 0. \quad (1.12)$$

As quantidades c_{ij}^k são chamadas **constantes de estrutura** e seus valores determinam tanto as propriedades da álgebra como aquelas do grupo de Lie associado.

Transformações de Simetria: Pode-se definir as transformações de simetria de um sistema físico em termos das equações de movimento deste. Para isto, considere o seguinte sistema de equações:

$$\hat{O}_i \Psi_i = 0 \quad i = 1, 2, \dots \quad (1.13)$$

As funções $\Psi_i(x)$ podem ser vetores-coluna finitos ou infinitos, ou ainda, matrizes que dependem das variáveis x_i . Os operadores $\hat{O}_i$ são quaisquer e podem corresponder, por exemplo, às

¹Lembramos que aqui, como em alguns textos não formais, não há distinção entre grupos e álgebras.

²De fato, a identidade de Jacobi é prontamente satisfeita usando-se apenas a definição de comutador. O que se deve impor é que as constantes de estrutura devam ser consistentes com a mesma. Para tal, devem satisfazer as relações $\sum_{lm} (c_{il}^m c_{jk}^l + c_{kl}^m c_{ij}^l + c_{jl}^m c_{ki}^l) = 0$ para quaisquer i, j, k .

equações de Maxwell, Schroedinger ou Dirac. Os operadores $\hat{g}_{ij}$ que satisfazem:

$$\sum_j \hat{O}_i(\hat{g}_{ij})\Psi_j = 0, \quad i = 1, 2 \quad (1.14)$$

são chamados de transformações de simetria, uma vez que levam as soluções $\vec{\Psi}$ em outras soluções $g\vec{\Psi}$ das equações (1.13).

Considere, como exemplo, a equação de Schroedinger dependente do tempo:

$$(\hat{H}(\mathbf{x}, t) - i\frac{\partial}{\partial t})\Psi(\mathbf{x}, t) = 0. \quad (1.15)$$

Pode-se verificar que $\hat{k}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t)\Psi(\mathbf{x}, t)$ também é solução de (1.15) desde que $\hat{k}_j$ satisfaça:

$$[\hat{H}, \hat{k}_j] - i\frac{\partial \hat{k}_j}{\partial t} = 0, \quad (1.16)$$

o que significa que $\hat{k}_j$ está associado a uma quantidade conservada. Este último fato decorre da definição da derivada total de um operador, por exemplo $\hat{A}_j$,

$$\frac{d\hat{A}_j}{dt} = \frac{\partial \hat{A}_j}{\partial t} + i[\hat{H}, \hat{A}_j], \quad (1.17)$$

sendo $\hat{H}$ a hamiltoniana de um sistema quântico.

Se $\hat{k}_1$ e $\hat{k}_2$ satisfazem (1.16) pode-se mostrar, utilizando a identidade de Jacobi (1.12), que o comutador destes é uma constante do movimento, ou seja:

$$\frac{d}{dt}[\hat{k}_1, \hat{k}_2] = \frac{\partial}{\partial t}[\hat{k}_1, \hat{k}_2] - [\frac{\partial \hat{k}_1}{\partial t}, \hat{k}_2] - [\hat{k}_1, \frac{\partial \hat{k}_2}{\partial t}] = 0. \quad (1.18)$$

Se o conjunto dos $\hat{k}_i$ fechar sob comutação e formar uma álgebra de Lie, diz-se que tais operadores são os geradores desta álgebra. Em geral, o conjunto destes operadores não comuta com a hamiltoniana do sistema, mas satisfaz à equação (1.16). Já os operadores independentes do tempo $\hat{k}_j(\mathbf{x}, \mathbf{p}, t = 0)$ satisfazem as mesmas relações de comutação, mas devido à equação (1.16) não são, em geral, integrais do movimento.

A equação de Schroedinger independente do tempo é:

$$(\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{p}) - E_n)\Psi_n(\mathbf{x}) = 0, \quad (1.19)$$

com $\Psi(\mathbf{x}, t) = e^{-iE_n t} \Psi_n(\mathbf{x})$.

Os operadores acima constituem a álgebra dinâmica da equação (1.19) e conectam todas as soluções $\Psi_n(\mathbf{x})$ entre si, incluindo também aqueles estados que não são degenerados. Devido ainda à equação (1.16), somente os geradores $\hat{k}_j$ que não dependem do tempo satisfazem

$$[\hat{H}, \hat{k}_j] = 0, \quad (1.20)$$

o que implica que eles são constantes do movimento para o sistema (1.19). A equação (1.20), aliada ao fato destes geradores fecharem sob comutação, define a álgebra de simetria para este sistema. A conexão entre a álgebra dinâmica ($\hat{k}_j(0)$) e aquela de simetria do sistema dependente do tempo ($\hat{k}_j(t)$) permite uma definição única da álgebra dinâmica [14].

1.3.2 Invariantes de Casimir e constantes do movimento

Da discussão da seção anterior (1.3.1), vê-se que as álgebras de Lie associadas às equações de Schroedinger dependente e independente do tempo fornecem integrais do movimento para sistemas físicos. Além disso, a álgebra dinâmica da equação independente do tempo é tal que todas as soluções $\Psi_n(\vec{x})$ estão conectadas através de geradores, o que significa que a álgebra dinâmica implicitamente define o espaço de Hilbert para descrição de um dado sistema físico. Para qualquer álgebra de Lie pode-se construir um ou mais operadores $\hat{C}_l$ que comutam com todos os geradores $\hat{k}_j$, ou seja,

$$[\hat{C}_l, \hat{k}_j] = 0, \quad l = 1, \dots, r; \quad j = 1, \dots, s. \quad (1.21)$$

Estes operadores são chamados de **operadores** ou **invariantes de Casimir**. Na seção (1.2) apareceram alguns exemplos destes operadores para $U(2)$ e $SU(2)$. Tais operadores, podem ser lineares, quadráticos, ou de ordem mais alta nos geradores. O número r de invariantes de Casimir que são independentes é chamado de ordem da álgebra, e coincide com o número de elementos do máximo subconjunto de geradores que comutam entre si [15],

$$[\hat{k}_\alpha, \hat{k}_\beta] = 0, \quad \alpha, \beta = 1, 2, \dots, r. \quad (1.22)$$

Os operadores $\hat{C}_l$ e $\hat{k}_\alpha$ podem, portanto, ser diagonalizados simultaneamente e seus autovalores são usados para **rotular** os autoestados correspondentes. Um outro exemplo, além daquele apresentado na seção (1.2), é o dos operadores do momento angular de $O(3)$ que são isomórficos em relação àqueles operadores de isospin de $U(2)$. Neste caso, $r = 1$ e escolhe-se um deles, por exemplo, $\hat{l}_z$ como o gerador a ser diagonalizado com o Casimir $\hat{L}^2 = \sum_i \hat{l}_i^2$. Os autovalores para o conjunto $(\hat{C}_l, \hat{k}_\alpha)$ podem ser determinados a partir das relações de comutação (1.11). Para o caso acima define-se os operadores $\hat{l}_\pm = \hat{l}_x \pm i\hat{l}_y$ e faz-se uso de $[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\varepsilon_{ijk}\hat{l}_k$ obtendo-se o resultado (em unidades de $\hbar$) bem conhecido [16]:

$$\begin{aligned}\hat{l}^2|lm\rangle &= l(l+1)|lm\rangle \\ \hat{l}_z|lm\rangle &= m|lm\rangle.\end{aligned}\tag{1.23}$$

Já a ação dos operadores $\hat{l}_\pm$ nos estados $|lm\rangle$ é dada por:

$$\hat{l}_\pm|lm\rangle = \sqrt{(l \mp m)(l \pm m + 1)}|lm \pm 1\rangle.\tag{1.24}$$

Este é um exemplo simples, mas, em casos mais gerais, muito embora os procedimentos sejam bem mais complicados, são aplicadas as mesmas idéias que aquelas apresentadas aqui. Concluindo com o exemplo da equação de Schroedinger: nesta seção mostrou-se que as álgebras de simetria fornecem constantes de movimento que levam aos números quânticos, rotulando por sua vez estados associados a um dado autovalor. Os operadores como $\hat{l}_\pm$ conectam estados degenerados. Já as álgebras dinâmicas definem todo o conjunto de autoestados associados a um dado sistema. Os geradores não são mais constantes do movimento uma vez que nem todos comutam com a hamiltoniana e os operadores de *abaxamento* e *levantamento* podem conectar todos os estados.

1.3.3 Representações e autofunções

Para um dado grupo G de operações físicas R pode-se introduzir um conjunto de operadores $\hat{P}_R$ que são definidos pela sua ação em funções escalares arbitrárias $f(x)$:

$$\hat{P}_R f(x) = f(R^{-1}x).\tag{1.25}$$

As rotações bi-dimensionais constituem um exemplo de tais transformações. Usando então a equação (1.25) em coordenadas polares,

$$\hat{P}_\alpha f(r, \phi) = f(r, \phi - \alpha), \quad (1.26)$$

e fazendo-se a expansão em série de Taylor,

$$\begin{aligned} & \sum_{n=0}^{\infty} (-\alpha)^n \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f(r, \phi)}{\partial \phi^n} \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(-\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}\right)^n f(r, \phi) \\ &= e^{-\alpha \frac{\partial}{\partial \phi}} f(r, \phi), \end{aligned} \quad (1.27)$$

chega-se, de acordo com (1.25), em

$$\hat{P}_\alpha = e^{-i\alpha \hat{l}_z} \quad \hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}. \quad (1.28)$$

Definindo-se agora a seguinte equação:

$$\hat{H}(\mathbf{x}) f(\mathbf{x}) = g(\mathbf{x}), \quad (1.29)$$

com $\hat{H}(\mathbf{x})$ sendo um operador arbitrário, e usando a propriedade (1.25), seguem as duas relações a seguir:

$$\begin{aligned} \hat{P}_R \hat{H}(\mathbf{x}) \hat{P}_R^{-1} \hat{P}_R f(\mathbf{x}) &= \hat{P}_R g(\mathbf{x}) = g(\hat{R}\mathbf{x}) = \hat{H}(\hat{R}\mathbf{x}) f(\hat{R}\mathbf{x}) \\ \hat{P}_R \hat{H}(\mathbf{x}) \hat{P}_R^{-1} \hat{P}_R f(\mathbf{x}) &= \hat{P}_R \hat{H}(\mathbf{x}) \hat{P}_R^{-1} f(\hat{R}\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (1.30)$$

Como $f(\mathbf{x})$ é arbitrária, a comparação entre as duas equações acima mostra que os operadores transformam-se como:

$$\hat{P}_R \hat{H}(\mathbf{x}) \hat{P}_R^{-1} = \hat{H}(\hat{R}\mathbf{x}). \quad (1.31)$$

Se para todo o R valer

$$\hat{P}_R \hat{H}(\mathbf{x}) \hat{P}_R^{-1} = \hat{H}(\mathbf{x}), \quad (1.32)$$

diz-se que $\hat{H}(\mathbf{x})$ é invariante sob a ação do grupo $G = (R)$, ou que G é um grupo de simetria de $\hat{H}(\mathbf{x})$, o que está de acordo com a discussão da seção (1.3.1) em sua equação (1.20) na medida em que (1.32) implica em:

$$[\hat{P}_R, \hat{H}(\mathbf{x})] = 0; \quad (1.33)$$

dessa forma, da equação de Schroedinger independente do tempo e da relação acima tem-se que:

$$\hat{H}(\hat{P}_R \Psi) = E(\hat{P}_R \Psi). \quad (1.34)$$

Se o autovalor E for degenerado e tiver associado a si l autofunções independentes $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$, a equação (1.34) mostra que $\hat{P}_R \psi$ também é autofunção da hamiltoniana associada ao autovalor E e portanto deve ser escrita como combinação linear dos ψ 's conforme mostra a equação (1.35).

$$\hat{P}_R \psi_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^l D_{ji}(R) \psi_j(\mathbf{x}). \quad (1.35)$$

O conjunto das matrizes $D(R)$, de elementos $D_{ji}(R)$, é chamado de **representação** do grupo G e as l autofunções definem uma base para esta representação. Se, além disso, os ψ 's são tais que nenhuma transformação de base

$$\Phi_i = \sum_j U_{ij} \psi_j, \quad (1.36)$$

pode levar todas as matrizes D à mesma forma bloco-diagonal, diz-se então que a representação é **irredutível** e que os ψ 's são uma base para uma **representação irredutível** do grupo G . A forma bloco-diagonal das matrizes D implica que quaisquer dois subconjuntos das l funções de onda ψ 's transformam-se somente entre si sob a ação de $G = (R)$.

Pode-se usar como exemplo o grupo $SO(3)$, onde uma base adequada para as representações irredutíveis é dada pelos harmônicos esféricos $Y_m^l(\theta, \phi)$ [16]. A ação dos elementos do grupo de rotação é dada por:

$$\hat{P}_R(\theta_1, \theta_2, \theta_3) Y_m^l(\theta, \phi) = \sum_{m'} D_{m,m'}^l(\theta_1, \theta_2, \theta_3) Y_{m'}^l(\theta, \phi), \quad (1.37)$$

com as matrizes de Wigner $\mathbf{D}$ tendo o papel das representações irredutíveis de $SO(3)$.

Para grupos de Lie arbitrários a generalização da equação (1.37) é

$$\hat{P}_R f_\mu^\lambda(\mathbf{x}) = \sum_{\mu'} D_{\mu, \mu'}^\lambda(R) f_{\mu'}^\lambda(\mathbf{x}), \quad (1.38)$$

com λ representando, em geral, um conjunto de números quânticos que rotulam as representações irredutíveis do grupo $G = (R)$, enquanto os μ 's rotulam as diferentes funções na representação. As equações de autovalores para este caso geral são:

$$\begin{aligned} C_l f_\mu^\lambda(\mathbf{x}) &= h_l(\lambda) f_\mu^\lambda(\mathbf{x}), \\ \hat{k}_\alpha f_\mu^\lambda(\mathbf{x}) &= \sum_{\mu'} h_\alpha(\mu\mu') f_{\mu'}^\lambda(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (1.39)$$

com C_l e $\hat{k}_\alpha$ sendo o operador de Casimir e os geradores respectivamente. Os autovalores $h_l(\lambda)$ e $h_\alpha(\mu\mu')$ podem ser determinados a partir das relações de comutação que definem a álgebra de Lie associada a G .

1.3.4 Algumas representações tensoriais de grupos de Lie

Quando se aplica a teoria de grupos a problemas físicos, deve-se representar um dado grupo abstrato G em algum espaço vetorial com o intuito de encontrar números quânticos necessários à classificação dos estados. As representações mais comumente usadas são aquelas dos grupos Unitários, Ortogonais e Simpléticos, e são apresentadas em termos de tensores irredutíveis de ordem n ³. Nesta seção tais representações serão apresentadas brevemente.

Grupos Unitários $U(n)$: As representações irredutíveis de $U(n)$ são caracterizadas por n inteiros $[f_1, f_2, \dots, f_n]$ com

$$f_1 \geq f_2 \geq \dots \geq f_n \geq 0. \quad (1.40)$$

A cada representação do grupo corresponde um gráfico, conforme mostrado abaixo, que é chamado usualmente de **Tabela de Young** (ver Apêndice A-1).

³Para os grupos ortogonais existem algumas sutilezas devido à não equivalência das representações irredutíveis que correspondem a padrões auto-associados; não é o objetivo deste trabalho entrar em detalhes sobre este assunto.

$$\begin{array}{c}
\begin{array}{|c|c|c|c|}
\hline
\Box & \Box & \dots & \Box \\
\hline
\Box & \Box & \dots & \Box \\
\hline
\vdots & & & \\
\hline
\Box & & &
\end{array}
\begin{array}{l}
f_1 \\
f_2 \\
\vdots \\
f_n
\end{array}
\equiv [f_1 f_2 \dots f_n]
\end{array}$$

Estas representações tensoriais são simétricas sob permutações nas linhas e antissimétricas sob permutações nas colunas. A tabela de Young $[f_1, f_2 \dots f_n]$ rotula as representações irreduzíveis de $U(n)$.

Grupos Unitários Unimodulares $SU(n)$: Nos grupos unimodulares unitários a matriz de transformação tem determinante igual à unidade sendo que as representações correspondentes aos padrões

$$[f_1, f_2, \dots, f_n] \text{ e } [f_1 + s, f_2 + s, \dots, f_n + s], \quad s \in \mathbb{Z}. \quad (1.41)$$

são equivalentes. Portanto, tudo o que se faz para $SU(n)$ é considerar somente padrões com uma linha a menos, ou seja:

$$[f_1, f_2 \dots f_n] = [f_1 - f_n, f_2 - f_n, \dots, f_{n-1} - f_n], \quad (1.42)$$

o que em termos das Tabelas de Young pode ser representado na figura abaixo.

$$\begin{array}{|c|c|c|c|}
\hline
\Box & \Box & \Box & \Box \\
\hline
\Box & \Box & \Box & \\
\hline
\Box & & &
\end{array}
\equiv
\begin{array}{|c|c|c|}
\hline
\Box & \Box & \Box \\
\hline
\Box & \Box & \\
\hline
\Box & &
\end{array}$$

Grupos Ortogonais Na redução de um grupo $U(n)$ para um grupo $O(n)$ as representações tensoriais para uma dada simetria não são mais irreduzíveis devido ao fato de haver uma nova operação de contração que comuta com transformações ortogonais [17]. Então, as representações irreduzíveis de grupos ortogonais $O(n)$ são caracterizadas por ν números inteiros μ_i tais que

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_\nu \geq 0. \quad (1.43)$$

com $\nu = \frac{n}{2}$ para n um número par e $\nu = \frac{n-1}{2}$ para n ímpar.

1.3.5 Simetrias dinâmicas e o método algébrico

Nesta seção será descrita uma maneira de atacar um problema físico através do método algébrico. Para isso lança-se mão das definições apresentadas na seções anteriores.

Considerando a invariância da hamiltoniana mediante uma dada álgebra $g = (\hat{k}_j)$ tem-se a equação (1.20) que mostra que g é a álgebra de simetria para o sistema. Por sua vez, a equação (1.34) implica que um auto-estado da hamiltoniana com uma dada energia pode ser escrito como $|\lambda\mu\rangle$, com λ rotulando as representações irredutíveis do grupo G , correspondendo a g , e μ fazendo a distinção entres os diferentes autoestados com energia E ⁴. Os autovalores da hamiltoniana dependem então somente de λ , conforme abaixo:

$$\hat{H}|\lambda\mu\rangle = E(\lambda)|\lambda\mu\rangle, \quad (1.44)$$

além disso, a equação (1.38) implica que os geradores k_i juntamente com seus correspondentes operadores do grupo $\hat{P}_R$ não misturam estados com diferentes λ 's. Para introduzir o conceito de **simetria dinâmica** pode-se considerar a seguinte cadeia

$$g_1 \supset g_2. \quad (1.45)$$

Se g_1 é uma álgebra de simetria de $\hat{H}$, pode-se rotular seus auto-estados como $|\lambda_1\mu_1\rangle$, e como $g_2 \subset g_1$, g_2 também deve ser uma álgebra de simetria da hamiltoniana, com seus auto-estados sendo, conseqüentemente, $|\lambda_2\mu_2\rangle$. A equação de auto-valores para a hamiltoniana pode ser escrita, portanto, como:

$$\hat{H}|\lambda_1\lambda_2\mu_2\rangle = E(\lambda_1)|\lambda_1\lambda_2\mu_2\rangle, \quad (1.46)$$

com $\lambda_2\mu_2$ fazendo o papel de μ_1 e os autovalores dependendo somente de λ_1 . Este processo pode seguir quando existirem outras subálgebras além de g_2 .

Em geral a afirmação de que g_1 é uma álgebra de simetria da hamiltoniana é muito forte e deve ser relaxada, ou seja, considera-se a quebra desta simetria. Considere a seguinte hamiltoniana:

$$\hat{H}' = aC_{l_1}(g_1) + bC_{l_2}(g_2) \quad (1.47)$$

⁴Os μ 's podem ser escolhidos de tal forma a corresponder às representações irredutíveis dos subgrupos de G .

onde os C_{l_i} são os invariantes de Casimir das álgebras g_i . Desde que $[\hat{H}', \hat{k}_i] = 0$ para $\hat{k}_i \in g_2$, a hamiltoniana é invariante sob g_2 , mas não mais sob g_1 pois $[C_{l_2}(g_2), \hat{k}_i] \neq 0$ para $\hat{k}_i \notin g_2$. A nova *álgebra de simetria* é portanto g_2 , enquanto g_1 passa a ser a *álgebra dinâmica* para o sistema na medida em que todos os estados que se deseja descrever são aqueles associados com $E(\lambda_1)$. O que mede o grau de quebra de simetria neste caso é a razão b/a . Os autovalores de $\hat{H}'$ são obtidos a partir das equações (1.39) e dados por

$$\hat{H}'|\lambda_1\lambda_2\mu_2\rangle = (aE_{l_1}(\lambda_1) + bE_{l_2}(\lambda_2))|\lambda_1\lambda_2\mu_2\rangle. \quad (1.48)$$

O tipo de quebra de simetria que equações como (1.47) causam é chamado de **quebra dinâmica de simetria** e a simetria que resta é chamada de simetria dinâmica da hamiltoniana. Dos autovalores (1.48) conclui-se que, mesmo sendo $\hat{H}'$ não invariante sob g_1 , seus auto-estados são os mesmos que os de $\hat{H}$ em (1.46). Portanto, uma quebra dinâmica de simetria separa mas não mistura os auto-estados. Além de freqüentemente lançar mão das simetrias dinâmicas para o cálculo dos autovalores, o método algébrico vai um passo à frente na medida em que pode descrever todos os aspectos relevantes de um dado sistema físico puramente em termos algébricos e, para isso, tem-se um número de passos a serem seguidos [15]:

1. Um dado sistema é descrito em termos de uma álgebra dinâmica g_1 que gera todos os estados possíveis dentro de uma representação irredutível fixa. Deve-se dizer que a escolha da álgebra é usualmente feita através da análise da física inerente ao sistema.
2. Todos os operadores físicos devem ser construídos a partir dos geradores da álgebra. Como os elementos de matriz dos geradores podem ser calculados a partir das propriedades comutativas da álgebra, todos os observáveis do sistema podem ser calculados algebricamente.
3. As diferentes simetrias dinâmicas associadas à hamiltoniana de um sistema *fornecem* a base apropriada para o cálculo dos elementos de matriz.
4. Os autovalores dos invariantes de Casimir devem ser calculados para determinar-se completamente as bases das simetrias dinâmicas e seus autovalores. Alguns autovalores de

operadores de Casimir para grupos Unitários e Ortogonais são listados no apêndice A-2, assim como algumas propriedades destes grupos.

5. Quando existirem várias simetrias dinâmicas para um dada hamiltoniana deve-se escolher uma das bases para sua diagonalização. As simetrias dinâmicas são também importantes pois podem-se obter casos limites onde todos os observáveis são obtidos analiticamente.

1.4 Resumo

Neste capítulo foram apresentados conceitos e definições fundamentais que serão utilizados ao longo de todo o texto. Termos como invariantes de Casimir, representações irredutíveis e simetrias dinâmicas serão recorrentes ao longo do trabalho. Tentamos com este apanhado geral encontrar um caminho intermediário entre o formalismo e os exemplos físicos reconhecendo, entretanto, que nada de novo foi apresentado, e o que é mais importante, muitas vezes a intuição não é suficiente para tratarmos sistemas físicos via a utilização de teoria de grupos, fazendo-se necessário o emprego de técnica apurada no assunto. O próximo capítulo, dedicado ao modelo de bósons interatuantes, servirá, além de apresentar o modelo em suas duas primeiras versões, como exemplo de utilização da abordagem algébrica apresentada.

Capítulo 2

O modelo de bósons interatuantes

2.1 Introdução

O estudo do movimento coletivo no núcleo atômico é um dos aspectos mais interessantes da física nuclear. Passos importantes dados na direção da sua compreensão como um sistema coletivo foram dados na década de 50 experimentalmente por James Rainwater [18] e por Aage Bohr e Ben Mottelson do lado teórico [19].

Muitos dos modelos bosônicos desenvolvidos até o início da década de 70 [20] podiam ser encarados como generalizações da velha hamiltoniana de Bohr-Mottelson, na qual o movimento coletivo dos núcleons é descrito em termos dos cinco graus de liberdade quadrupolares $\alpha_{2,\mu}$. Um dos problemas encontrados nestas abordagens e, comprovado via técnicas de expansão bosônicas [21], consiste no fato de que termos de ordens mais altas contendo não apenas operadores de dois corpos são importantes, tornando complicado o tratamento do núcleo como um sistema coletivo.

Em 1975 Arima e Iachello introduziram o modelo de bósons interatuantes (**IBM**), originalmente chamado de aproximação de bósons interatuantes (**IBA**), onde os graus de liberdade coletivos do núcleo são tratados em termos de bósons monopulares e quadrupolares, com $l = 0$ e $l = 2$, sendo denotados como bósons s e d respectivamente [22]. Uma grande diferença entre o IBM e os outros modelos desenvolvidos na mesma época consiste no fato de que o primeiro

assume que o número total de bósons no núcleo é conservado, ademais, estes bósons podem ser encarados como pares fermiônicos. Outra característica fundamental do IBM é a de poder unificar em uma única hamiltoniana a descrição de núcleos par-pares vibracionais e rotacionais¹, além de tratar sistemas onde os prótons e nêutrons ocupam as mesmas camadas de valência² (IBM-2). Também pode-se incluir de maneira natural a simetria de isospin utilizando-se suas terceira e quarta versões (IBM-3 e IBM-4). Ainda, os sistemas de massa ímpar podem ser estudados via o modelo de bósons e férmions interatuantes (IBFM) e suas subseqüentes versões. Neste caso, aparece o importante conceito de supersimetria.

Retendo-nos um pouco mais aos aspectos históricos, deve-se lembrar que na época em que o IBM foi introduzido, os graus de liberdade coletivos dos núcleos deformados já eram descritos com sucesso pelo modelo de Bohr-Mottelson [24]. Outro aspecto peculiar é que, os modelos bosônicos correntes na época, não consideravam a conservação do número de bósons.

Em três trabalhos sucessivos, Arima e Iachello mostraram que o IBM podia reproduzir as propriedades de três categorias diferentes de núcleos, as quais correspondem geometricamente àquelas de um oscilador anarmônico (vibracional), um sistema axialmente simétrico deformado (rotacional) e a um oscilador gama-instável [25]. Nestes limites a hamiltoniana do modelo tem solução analítica, enquanto que nos casos intermediários tem-se que efetuar cálculos computacionais onde o espaço de configuração é consideravelmente menor do que aquele do modelo de camadas.

Somente com o surgimento da segunda versão do IBM, com a distinção entre os bósons pp e nn , a conexão deste modelo bosônico com o modelo de camadas (fermiônico) começou a ser estabelecida [26]. Pouco tempo depois, no começo da década de 80, surgiram as versões invariantes por isospin, tendo sido propostas por Elliot e White (IBM-3) [27] e Elliot e Evans (IBM-4) [28].

¹Deve ser dito neste ponto que o modelo do Bohr também trata sistemas vibracionais e rotacionais mas, não de maneira unificada como o IBM.

²Vale a pena mencionar a existência de uma versão do modelo de Bohr-Mottelson que trata os dois fluidos independentemente [23].

O leitor deve encarar este capítulo como uma revisão do IBM. Nele, o modelo será apresentado em suas primeira e segunda versões. Será dada a devida importância às versões invariantes em isospin no capítulo seguinte. Não é o objetivo deste trabalho cobrir todas as possibilidades que o modelo oferece e, por isso, tentar-se-á fazer a bibliografia a mais abrangente possível.

O capítulo é organizado da seguinte maneira: serão apresentados, inicialmente, os aspectos formais do IBM-1 através da introdução dos operadores bosônicos: a hamiltoniana, os operadores de transição eletromagnéticas e de transferência de pares. A seguir, as três simetrias dinâmicas e seus resultados, através dos exemplos clássicos, acompanhados dos resultados experimentais, serão discutidas. Finalmente, as idéias principais do IBM-2 serão apresentadas, sendo algumas seções dedicadas à justificação microscópica do modelo.

2.2 O IBM-1

Nesta seção apresenta-se a formulação “macroscópica” do IBM, ou seja, são discutidos aspectos de sua estrutura algébrica e descritas as propriedades coletivas nucleares em termos fenomenológicos, como é feito na referência [29].

Em sua versão mais simples, o IBM assume que os estados nucleares de mais baixa energia de núcleos par-pares situados longe das camadas fechadas são tratados em termos de excitações de pares de prótons ou nêutrons de valência. Assume-se, também, que o caroço nuclear é inerte. Além disso, as configurações importantes para a descrição das propriedades desses estados são aquelas nas quais partículas idênticas estão acopladas em pares fermiônicos de momento angular $l = 0$ e $l = 2$, assumidos serem bósons, e denominados de bósons s e d , respectivamente,

No IBM-1 não há distinção entre os bósons constituídos por prótons e aqueles formados por nêutrons, pois para a região de massa onde o modelo foi originalmente concebido esses bósons ocupam camadas muito diferentes, sendo o papel da interação nêutron-próton negligenciável.

Levando-se em conta a terminologia usual em termos da conjugação de partículas-buracos, o número de pares de prótons (nêutrons) de valência, denotado por N_π (N_ν), é contado a partir da camada fechada mais próxima segundo a seguinte convenção: *se menos da metade*

da camada estiver preenchida o número de pares de **partículas** será considerado o número de **bósons**, do contrário, o número de pares de **buracos** será considerado como tal. As próximas seções serão dedicadas à apresentação da estrutura algébrica do modelo.

2.2.1 Operadores bosônicos

No IBM, as excitações nucleares coletivas são descritas por bósons e o formalismo adequado a ser utilizado para sua descrição é aquele da segunda quantização. Aqui, são introduzidos operadores de criação e de aniquilação bosônicos com multipolaridade l e projeção m , ou seja $b_{l,m}^\dagger$ e $b_{l,m}$. Os estados nucleares de mais baixas energias são descritos por um bóson de monopolo s com $L^\pi = 0^+$ e por um bóson de quadrupolo d com $L^\pi = 2^+$:

$$\begin{aligned} s^\dagger, d_\mu^\dagger \quad (\mu = 0, \pm 1, \pm 2) \\ \tilde{s}, \tilde{d}_\mu \quad (\mu = 0, \pm 1, \pm 2), \end{aligned} \quad (2.1)$$

com $\tilde{s} = s$ e $\tilde{d}_\mu = (-)^{l+\mu} d_{-\mu}$ transformando-se como um tensor esférico. Mais compactamente pode-se escrever:

$$b_{l,m}^\dagger; \tilde{b}_{l,m} \quad (l = 0, 2; -l \leq m \leq l), \quad (2.2)$$

com as relações de comutação dadas por:

$$\begin{aligned} [b_{l,m}, b_{l',m'}^\dagger] &= \delta_{ll'} \delta_{mm'} \\ [b_{l,m}, b_{l',m'}] &= [b_{l,m}^\dagger, b_{l',m'}^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Os estados que geram as representações do espaço bosônico devem ser construídos de tal modo que o momento angular sempre seja um bom número quântico e isto se faz através do acoplamento adequado dos bósons, ou seja,

$$[b_l^\dagger \times b_{l'}^\dagger \times \dots]_M^{(L)} |0\rangle. \quad (2.4)$$

Entretanto, como o momento angular nem sempre é suficiente para caracterizar os estados de maneira única, pois podem existir vários estados com o mesmo valor de L , devem-se buscar simetrias adicionais com o intuito de rotulá-los adequadamente.

2.2.2 A hamiltoniana do IBM-1

A hamiltoniana nuclear bosônica mais geral contendo termos de até dois corpos nos bósons s e d e que conserva o número total de bósons, uma característica fundamental do IBM em suas várias versões, é dada por:

$$\hat{H} = E_0 + \sum_{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta} + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{1}{2} u_{\alpha\beta\gamma\delta} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} b_{\gamma} b_{\delta}, \quad (2.5)$$

sendo E_0 , $\varepsilon_{\alpha\beta}$ e $u_{\alpha\beta\gamma\delta}$ constantes. Note-se que cada termo de (2.5) tem o mesmo número de operadores de criação e de aniquilação de bósons (conservação do número bosônico!). Reescrevendo este operador que deve ser um escalar em termos dos bósons s e d ,

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_0 + \varepsilon_s (s^{\dagger} \cdot \tilde{s}) + \varepsilon_d (d^{\dagger} \cdot \tilde{d}) + \sum_{L=0,2,4} \frac{1}{2} \sqrt{2L+1} c_L [(d^{\dagger} \times d^{\dagger})^L \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^L]_0^0 + \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} v_2 [(d^{\dagger} \times d^{\dagger})^2 \times [\tilde{d} \times \tilde{s}]^2 + [d^{\dagger} \times s^{\dagger}]^2 \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^2]_0^0 + \\ & \frac{1}{2} v_0 [(d^{\dagger} \times d^{\dagger})^0 \times [\tilde{s} \times \tilde{s}]^0 + [s^{\dagger} \times s^{\dagger}]^0 \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^0]_0^0 + \\ & u_2 [(d^{\dagger} \times s^{\dagger})^2 \times [\tilde{d} \times \tilde{s}]^2]_0^0 + \frac{1}{2} u_0 [(s^{\dagger} \times s^{\dagger})^0 \times [\tilde{s} \times \tilde{s}]^0]_0^0, \end{aligned} \quad (2.6)$$

pode-se ver que ele possui dois termos de um corpo, com parâmetros ε_s e ε_d , e sete termos de dois corpos, com parâmetros c_L , v_L e u_L . Devido à conservação do número bosônico, alguns dos termos são eliminados utilizando-se

$$\begin{aligned} \hat{n}_s &= s^{\dagger} s \rightarrow \text{número de bósons } s \\ \hat{n}_d &= \sum_{\mu} d_{\mu}^{\dagger} d_{\mu} \rightarrow \text{número de bósons } d \\ \hat{N} &= \hat{n}_s + \hat{n}_d, \end{aligned} \quad (2.7)$$

deste modo, pode-se ainda reescrever (2.6) como

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_0 + \varepsilon_s N + \frac{1}{2} u_0 N(N-1) + \varepsilon' (d^{\dagger} \cdot \tilde{d}) + \sum_{L=0,2,4} \frac{1}{2} \sqrt{2L+1} c'_L [(d^{\dagger} \times d^{\dagger})^L \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^L]_0^0 + \\ & \frac{1}{\sqrt{2}} v_2 [(d^{\dagger} \times d^{\dagger})^2 \times [\tilde{d} \times \tilde{s}]^2 + [d^{\dagger} \times s^{\dagger}]^2 \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^2]_0^0 + \\ & \frac{1}{2} v_0 [(d^{\dagger} \times d^{\dagger})^0 \times [\tilde{s} \times \tilde{s}]^0 + [s^{\dagger} \times s^{\dagger}]^0 \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^0]_0^0, \end{aligned} \quad (2.8)$$

na qual,

$$\begin{aligned}\varepsilon' &= (\varepsilon_d - \varepsilon_s) + \frac{1}{\sqrt{5}}u_2(N-1) - u_0(N-1) \\ c'_L &= c_L + u_0 - \frac{2}{\sqrt{5}}u_2.\end{aligned}\tag{2.9}$$

Definindo agora

$$E'_0 = E_0 + \varepsilon_s N + \frac{1}{2}u_0 N(N-1),\tag{2.10}$$

observa-se que a equação (2.10) é a mesma para todos os estados com número total de bósons fixo, ou seja, para um dado núcleo. Logo, ela não contribui para energias de excitação, mas tão somente para as energias de ligação dos núcleos.

2.2.3 Operadores de transição eletromagnética e de transferência de pares

Além da hamiltoniana (2.8), pode-se ainda construir operadores para o cálculo de transições eletromagnéticas e transferência de pares.

Os operadores de transição eletromagnéticas com multipolaridade l são escritos em termos dos operadores bosônicos como

$$T^{(l)} = t_0^{(0)}\delta_{l0} + \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta}^l b_\alpha^\dagger b_\beta + \dots\tag{2.11}$$

Lembrando que estes operadores devem transformar-se como tensores esféricos de ordem l , deve-se utilizar a notação acoplada conforme abaixo:

$$T_\mu^l = t_0^l\delta_{l0} + \sum_{r,r'} t_{r,r'}^{(l)} [b_r^\dagger \times \tilde{b}_{r'}]_\mu^{(l)} + \dots,\tag{2.12}$$

a qual em termos dos bósons s e d pode reescrita como,

$$\begin{aligned}T_0^{(E0)} &= \gamma_0 + \alpha_0[s^\dagger \times \tilde{s}]_0^{(0)} + \beta_0[d^\dagger \times \tilde{d}]_0^{(0)} \\ T_\mu^{(M1)} &= \beta_1[d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(1)}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T_\mu^{(E2)} &= \alpha_2[d^\dagger \times \tilde{s} + s^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(2)} + \beta_2[d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(2)} \\
T_\mu^{(M3)} &= \beta_3[d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(3)} \\
T_\mu^{(E4)} &= \beta_4[d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(4)}.
\end{aligned} \tag{2.13}$$

As equações (2.13) são construídas até multipolaridade $l = 4$, quando se leva em conta somente o termo de um corpo.

Escrevem-se os operadores de transferência de pares em termos de operadores de um corpo como:

$$\begin{aligned}
P_+^l &= \sum_\alpha p_\alpha^l b_\alpha^\dagger \\
P_-^l &= \sum_\alpha p_\alpha^l b_\alpha,
\end{aligned} \tag{2.14}$$

relacionados à adição ou subtração de um bóson. Até aqui somente pares com $l = 0$ e $l = 2$ foram considerados.

2.2.4 Álgebras e sub-álgebras bosônicas

A partir desta seção, muitos dos conceitos apresentados no primeiro capítulo serão utilizados na apresentação da estrutura algébrica do IBM.

Considere o conjunto de produtos bilineares de operadores de criação e aniquilação bosônicos $b_\alpha^\dagger$ e b_β

$$G_{\alpha\beta} = b_\alpha^\dagger b_\beta, \tag{2.15}$$

satisfazendo as seguintes relações de comutação:

$$[G_{\alpha\beta}, G_{\gamma\delta}] = G_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - G_{\gamma\beta}\delta_{\delta\alpha}. \tag{2.16}$$

Operadores que satisfazem as seguintes relações de comutação:

$$[X_a, X_b] = \sum_c C_{ab}^c X_c; \quad \text{onde} \quad C_{ab}^c = -C_{ba}^c, \tag{2.17}$$

juntamente com a identidade de Jacobi,

$$[[X_a, X_b], X_c] + [[X_b, X_c], X_a] + [[X_c, X_a], X_b] = 0 \tag{2.18}$$

formam uma álgebra de Lie.

Os operadores (2.15), trinta e seis ao todo, satisfazem as relações de comutação da álgebra unitária em seis dimensões $U(6)$ e associados a cada álgebra existem grupos de transformações. Neste caso o grupo associado a esta álgebra é o grupo $U(6)$.

Em uma notação mais apropriada pode-se escrever (2.15) como:

$$G_{\mu}^k(l, l') = [b_l^{\dagger} \times \tilde{b}_{l'}]_{\mu}^{(k)} \quad (l, l' = 0, 2), \quad (2.19)$$

que são os geradores da álgebra $U(6)$ ³.

As relações de comutação para os operadores (2.19) são explicitamente mostradas em [30] e dadas por:

$$[G_{\kappa}^k(l, l'), G_{\kappa'}^{k'}(l'', l''')] = \sum_{k'', \kappa''} \sqrt{2k+1} \sqrt{2k'+1} \times C_{\kappa \kappa' \kappa''}^{k k' k''} \times \left[(-)^{k+k'+k''} \left\{ \begin{matrix} k k' k'' \\ l'' l' l''' \end{matrix} \right\} \delta_{l' l''} G_{\kappa''}^{k''}(l, l''') - \left\{ \begin{matrix} k k' k'' \\ l'' l' l \end{matrix} \right\} \delta_{l, l''} G_{\kappa''}^{k''}(l'', l') \right], \quad (2.20)$$

onde $C_{\kappa \kappa' \kappa''}^{k k' k''}$ é o coeficiente de Clebsch-Gordan apropriado e os termos entre chaves, $\{\dots\}$, indicam os coeficientes $6j$.

Como mostrado no primeiro capítulo, dada uma álgebra g , qualquer subconjunto h de g fechado em relação à comutação é chamado de uma sub-álgebra de g .

Com o objetivo de classificar os estados nucleares, assim como construir bases apropriadas para diagonalizar a hamiltoniana, é necessário gerar todas as possíveis subálgebras de $U(6)$. No caso do IBM, onde se requer que os estados tenham o momento angular total como um bom número quântico, deve-se incluir sempre como sub-álgebra de $U(6)$ a álgebra das rotações tri-dimensionais, $SO(3)$, que, de acordo com o que foi discutido no capítulo anterior, é uma álgebra de simetria do sistema.

³Conforme mencionado no primeiro capítulo, não faremos distinção na notação utilizada para álgebras e grupos.

Pode-se mostrar que há três, e somente três, decomposições possíveis para $U(6)$, uma vez que $SO(3)$ deve necessariamente estar contida na redução; estas cadeias são:

$$\text{I)} \quad U(6) \supset U(5) \supset SO(5) \supset SO(3) \supset SO(2) \quad (2.21)$$

$$\text{II)} \quad U(6) \supset SU(3) \supset SO(3) \supset SO(2) \quad (2.22)$$

$$\text{III)} \quad U(6) \supset SO(6) \supset SO(5) \supset SO(3) \supset SO(2). \quad (2.23)$$

Estes três limites correspondem geometricamente a um vibrador anarmônico, a um rotor simétrico e a um rotor gama-instável, respectivamente. Pictoricamente, pode-se representar os três limites como sendo cada vértice de um triângulo, usualmente conhecido como *triângulo de Casten* [31]. Entre cada um destes vértices são encontradas as regiões de massa onde as situações intermediárias ocorrem, ou seja, onde não existem simetrias dinâmicas exatas (ver figura (2.1)).

Figura 2.1: Representação pictórica dos três limites do IBM-1.

Reescrevendo o que foi discutido no primeiro capítulo, a utilização da teoria de grupos em física é importante, pois a construção de representações onde a hamiltoniana possa ser convenientemente diagonalizada é desta forma possível. Isto ocorre porque os estados são caracterizados através de suas propriedades de transformação sob os grupos das cadeias (2.21)-(2.23), como no caso do IBM, ou, mudando um pouco o vocabulário, constroem-se bases que se transformam como representações dos grupos apropriados, além de rotular convenientemente os estados com bons números quânticos. Como no IBM-1 os estados nucleares são construídos

a partir de bósons idênticos, a função de onda deve ser totalmente simétrica. Isto significa que somente as representações totalmente simétricas de $U(6)$, rotuladas pelo número total de bósons do sistema $[N]$, são levadas em conta.

Nas próximas seções serão discutidos os três limites das cadeias algébricas (2.21)-(2.23). Juntamente com os resultados teóricos, serão apresentados os espectros experimentais que corroboram o modelo.

2.2.5 O limite vibracional

A base para a cadeia (2.21) é usualmente escrita como:

$$|[N], n_d, \nu, n_\Delta, L, M_L\rangle. \quad (2.24)$$

Os valores de n_d , o número de bósons d , contidos em uma dada representação $[N]$ de $U(6)$ correspondem à redução $U(6) \supset U(5)$ e são encontrados através da seguinte redução:

$$n_d = N, N-1, \dots, 1 \text{ ou } 0, \quad (2.25)$$

ou seja, todos os bósons podem estar num estado d ($N = n_d$), todos menos um bóson no estado d ($N-1 = n_d$) e assim por diante, até nenhum bóson estar neste estado ($n_d = 0$).

Por sua vez, aqueles valores da senioridade ν contidos em uma representação n_d de $U(5)$ podem ser obtidos utilizando-se a técnica de *quasi-spins* para os bósons [32], resultando em

$$\nu = n_d, n_d-2, n_d-4, \dots, 1 \text{ ou } 0. \quad (2.26)$$

As representações de $U(6)$, $U(5)$ e $SO(3)$ são totalmente simétricas. Contudo, indo de $SO(5)$ para $SO(3)$ vários estados com o mesmo valor do momento angular podem aparecer em uma dada representação ν de $SO(5)$. Logo, $SO(5)$ não é completamente redutível em relação a $SO(3)$. A redução $U(5) \supset SO(3)$ basicamente refere-se ao acoplamento de bósons d e à atribuição de uma senioridade ν a estes estados. Considerando somente os estados com estes bósons, vê-se que o estado fundamental $n_d = 0$ tem $\nu = 0$. Do mesmo modo, o primeiro estado excitado $n_d = 1$ tem $\nu = 1$. Dois bósons d podem ser acoplados aos momentos angulares

$L = 0, 2, 4$. Os estados com $L = 0$ tem $\nu = 0$, enquanto os estados com $L = 2, 4$ tem $\nu = 2$. A configuração d^3 leva aos estados simétricos $L = 0, 2, 3, 4, 6$. O estado com $L = 2$ é construído de tal modo que dois bósons sejam acoplados a $L = 0, 2, 4$. Por definição, atribui-se senioridade $\nu = 1$ para o estado com $L = 2$. Os demais estados d^3 têm $\nu = 3$. Para configurações d^4 os estados simétricos ⁴ têm $L = 0, 2^2, 4^2, 5, 6, 8$. Observa-se que existem agora dois estados com $L = 2$ e $L = 4$ que são diferenciados pela senioridade. Como estados com $L = 2$ podem ser construídos de tal modo que um par esteja acoplado a $L = 0$, pode-se atribuir a ele uma senioridade $\nu = 2$. O outro estado de mesmo momento angular é portanto um estado com $\nu = 4$. O estado com $L = 0$ tem $\nu = 0$ e os demais, $\nu = 4$. Para a configuração d^6 aparecem três estados com $L = 6$ e, existem somente duas possibilidades para a senioridade: $\nu = 4, 6$. Conclui-se desta maneira que a senioridade não é suficiente para rotular estados ortogonais com o mesmo momento angular, sendo necessário um número quântico adicional ⁵. No caso do IBM este número quântico tem um significado físico, sendo o *número de tripletos de bósons acoplados ao momento angular zero* n_Δ e, assumindo os seguintes valores:

$$n_\Delta = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

Finalmente, os dois estados com $L = 6$ remanescentes da configuração d^6 são diferenciados por terem $n_\Delta = 0, 1$. A discussão precedente pode ser visualizada na figura (2.2) onde é apresentado o espectro tipicamente vibracional para $N = 6$ bósons.

⁴Para rotular estados além de d^2 deve-se utilizar as tabelas de Young que são apresentadas no apêndice A.

⁵Deve-se dizer que este novo número não está associado a nenhum operador de Casimir e existe tão somente para rotular estados ortogonais com mesmo L e ν .

Figura 2.2: Espectros do limite vibracional do IBM-1 para $N = 6$ bósons. Os números quânticos (ν, n_Δ) são mostrados juntamente com o momento angular e a paridade para cada grupo de estados.

Para a redução $SO(5) \supset SO(3)$, que determina os valores do momento angular, vale o seguinte algoritmo:

$$\begin{aligned} n_d &= 2n_\beta + 3n_\Delta + \lambda, \\ n_\beta &= (n_d - \nu)/2. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Como a senioridade é encontrada utilizando-se a equação (2.26), tem-se

$$n_\beta = 0, 1, \dots, n_d/2, (n_d - 1)/2, \text{ para } n_d \text{ par ou ímpar}, \quad (2.29)$$

e o momento angular assume os seguintes valores:

$$L = \lambda, \lambda + 1, \dots, 2\lambda - 2, 2\lambda, \quad (2.30)$$

não podendo o momento angular assumir o valor $2\lambda - 1$.

Finalmente, os valores de M_L de $SO(2)$ contidos em uma dada representação de $SO(3)$ são dados por $-L \leq M_L \leq +L$.

A base (2.24) tem contra si o fato de não ser ortogonal e uma alternativa está na chamada base de Szpikowski. As transformações entre uma e outra são apresentadas em [29].

2.2.6 O limite rotacional

No limite rotacional $U(6) \supset SU(3) \supset SO(3) \supset SO(2)$ a base a ser construída é:

$$|[N], (\lambda, \mu), \tilde{\chi}, L, M_L\rangle, \quad (2.31)$$

onde (λ, μ) são os números quânticos de Elliot [9], sendo seus valores contidos em uma representação simétrica $[N]$ de $U(6)$ determinados através do seguinte procedimento:

$$\begin{aligned} (\lambda, \mu) = & (2N, 0) \oplus (2N - 4, 2) \oplus \dots \oplus \left\{ \begin{array}{c} (0, N) \\ (2, N - 1) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} N = \text{par} \\ N = \text{ímpar} \end{array} \right\} \\ & \oplus (2N - 6, 0) \oplus (2N - 10, 2) \oplus \dots \left\{ \begin{array}{c} (0, N - 3) \\ (2, N - 4) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{c} N - 3 = \text{par} \\ N - 3 = \text{ímpar} \end{array} \right\} \\ & \oplus \dots \end{aligned} \quad (2.32)$$

O problema de redução de uma representação de uma dada álgebra G para outra álgebra G' em geral é resolvido através da multiplicação de tabelas de Young. No caso $U(6) \supset SU(3)$ a seguir, esboçam-se os primeiros passos do procedimento e generaliza-se para o resultado (2.32).

O ponto de partida é notar que a representação fundamental [1] de $U(6)$ é 6-dimensional pois existem seis estados de partícula independente. Por outro lado, a representação $(2, 0)$ de $SU(3)$ também o é devido ao fato dos seus estados serem do tipo $aa, bb, cc, ab + ba, bc + cb$ e $ca + ac$. Logo, a tabela de Young [1] de $U(6)$ corresponde ao par $(2, 0)$ de $SU(3)$. O processo de construção (**building up process**) exige a *multiplicação paralela* entre as duas álgebras. Continuando com o exemplo, o primeiro passo em $U(6)$ é fazer:

$$[1] \times [1] = [2, 0] \oplus [1, 1], \quad (2.33)$$

o que corresponde em $SU(3)$ ao produto:

$$(2, 0) \times (2, 0) = (4, 0) \oplus (2, 1) \oplus (0, 2), \quad (2.34)$$

sendo $(4, 0)$ e $(0, 2)$ as representações irredutíveis (irreps) ⁶ simétricas. Associa-se, deste modo, à tabela $[2, 0] = [2]$ de $U(6)$ as representações $(4, 0)$ e $(0, 2)$ de $SU(3)$, concluindo-se que as últimas estão contidas na primeira. Por sua vez, a representação $(2, 1)$ de $SU(3)$ está contida na representação $[1, 1] = [1^1]$ de $U(6)$. Todavia, esta última representação de $U(6)$ não ocorre no IBM-1 restrito a $[N]$, o que faz com que todos os estados com $L = 1$ contidos em $(2, 1)$ desapareçam. O procedimento continua até que se obtenha o resultado (2.32).

A redução de $SU(3) \supset SO(3)$ também é feita pelo processo de construção, e aqui mostra-se o algoritmo para encontrar os momentos angulares L de $SO(3)$ contidos numa dada representação irredutível de $SU(3)$. Como no caso anterior, $SU(3)$ não é completamente redutível em relação a $SO(3)$, fazendo-se necessária a introdução de um outro número quântico, K , de modo que os estados sejam univocamente determinados [9]. Portanto, os valores de L contidos em uma dada irrep de $SU(3)$, com exceção de $K = 0$, são dados por:

$$L = K, K + 1, K + 2, \dots, K + \max\{\lambda, \mu\}, \quad (2.35)$$

com K sendo um número inteiro dado por:

$$K = \min\{\lambda, \mu\}, \min\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 1 \text{ ou } 0; \quad \min\{\lambda, \mu\} \text{ par ou ímpar.} \quad (2.36)$$

Quando $K = 0$ os valores do momento angular são:

$$L = \max\{\lambda, \mu\}, \max\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 1, \text{ ou } 0; \quad \max\{\lambda, \mu\} : \text{ par ou ímpar.} \quad (2.37)$$

Contudo, a base de Elliot não é ortogonal e introduz-se a chamada base de Vergados [33], onde ao invés de K propriamente dito, utiliza-se outro número quântico, denotado por $\tilde{\chi}$, cuja seqüência é a mesma que a dos números quânticos K . Note-se, entretanto, que os valores de L contidos em cada $\tilde{\chi}_i$ são diferentes daqueles contidos em K_i . Da equação (2.35) infere-se que

⁶Daqui em diante, quando forem mencionadas representações irredutíveis a sigla irreps será utilizada.

se um dado valor do momento angular ocorre em uma dada representação uma vez, ele está associado ao *menor valor possível* de $\tilde{\chi}_i$. Se este mesmo valor ocorrer duas vezes, ele estará associado aos dois mais baixos valores de $\tilde{\chi}_i$ e assim por diante, ocorrendo a única exceção para $\tilde{\chi} = 0$, quando vale a equação (2.37) para os $\tilde{\chi}$'s. Desta maneira, a base determinada é aquela dada pela equação (2.31).

2.2.7 O limite gama-instável

Na cadeia $U(6) \supset SO(6) \supset SO(5) \supset SO(3) \supset SO(2)$ a base apropriada é:

$$|[N], \sigma, \tau, \tilde{\nu}_\Delta, L, M_L\rangle. \quad (2.38)$$

No mesmo espírito da seção (2.2.5) os valores da irrep σ de $SO(6)$ contidos em uma representação simétrica $[N]$ de $U(6)$, utilizando desta vez *quasi-spins* também para os bósons s , são dados por:

$$\sigma = N, N - 2, N - 4, \dots, 1 \text{ ou } 0. \quad (2.39)$$

Os valores de τ de $SO(5)$ contidos em uma dada representação σ de $SO(6)$ são obtidos com um argumento semelhante ao que foi utilizado na seção (2.2.5) ou seja, um estado possível de $SO(6)$ ocorre quando todos os bósons associados com σ são bósons d , neste caso $\sigma = \tau$. Outra possibilidade ocorre quando todos, com exceção de um, são bósons d , então $\sigma = \tau + 1$. Seguindo o procedimento e invertendo as relações chega-se a:

$$\tau = \sigma, \sigma - 1, \sigma - 2, \dots, 1, 0. \quad (2.40)$$

Novamente, um número quântico extra é necessário, pois $SO(5)$ não é completamente redutível em relação a $SO(3)$. Este número é chamado de $\tilde{\nu}_\Delta$, e a base deste limite é dada, finalmente, pela equação (2.38).

Após a apresentação da estrutura algébrica do IBM, parte-se agora para a exploração das simetrias dinâmicas a ele associadas.

2.3 Simetrias dinâmicas

2.3.1 Operadores ou invariantes de Casimir

Para uma dada álgebra $X \in \mathfrak{g}$, existe um conjunto de operadores $\hat{C}$, denominados operadores ou invariantes de Casimir, que satisfazem $[\hat{C}, X_a] = 0$ para qualquer a . Na notação utilizada aqui, os operadores de Casimir são tais que:

$$[\hat{C}, \tilde{G}_\mu^{(k)}(l, l')] = 0. \quad (2.41)$$

Como exemplo, pode-se citar o operador número $\hat{N}$, que comuta com todos os 36 operadores de $U(6)$. Este é linear em todos os seus geradores como pode ser visto em sua definição abaixo:

$$\hat{C}_1(U(6)) = \hat{N} = G_0^{(0)}(s, s) + \sqrt{5}G_0^{(0)}(d, d) = \hat{n}_s + \hat{n}_d \quad (2.42)$$

A hamiltoniana (2.9) pode ser reescrita através de combinações lineares dos invariantes de Casimir de todos os grupos das três cadeias

$$\begin{aligned} \hat{H} = & e_1 \hat{C}_1(U(6)) + e_2 \hat{C}_2(U(6)) + \varepsilon \hat{C}_1(U(5)) + \alpha \hat{C}_2(U(5)) + \beta \hat{C}_2(SO(5)) + \\ & \gamma \hat{C}_2(SO(3)) + \delta \hat{C}_2(SU(3)) + \eta \hat{C}_2(SO(6)). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Em geral, o termo referente ao operador de Casimir $SO(2)$ não é incluído na hamiltoniana, pois sua influência é relevante somente no caso em que o núcleo for submetido a um campo magnético externo, o que causa a quebra na degenerescência de M_L .

A hamiltoniana (2.43) pode ser diagonalizada numericamente em qualquer uma das três bases construídas, mas historicamente, é utilizada aquela da simetria $U(5)$. Contudo, são obtidas soluções analíticas sempre que a hamiltoniana puder ser escrita em termos dos operadores de Casimir de uma das três cadeias do IBM-1,

$$\hat{H} = \alpha \hat{C}(G) + \beta \hat{C}(G') + \dots, \quad (2.44)$$

sendo $\hat{C}(G)$ o operador de Casimir de um grupo G que constitui a cadeia. Desde que esses operadores são diagonais em cada cadeia, seus autovalores podem ser encontrados analiticamente usando as expressões dadas no Apêndice A-2,

$$E = \alpha \langle \hat{C}(G) \rangle + \beta \langle \hat{C}(G') \rangle + \dots; \quad (2.45)$$

Em vários setores da Tabela Periódica são encontrados núcleos cujo comportamento experimental corresponde ao previsto em cada uma das três simetrias dinâmicas; essas regiões são representadas esquematicamente na figura (2.3).

Figura 2.3: Regiões da Tabela Periódica onde ocorrem as simetrias dinâmicas do IBM: (I) corresponde a $U(5)$, (II) a $SU(3)$ e (III) a $SO(6)$.

A seguir, mostram-se as expressões para as energias em cada uma das três cadeias, assim como cálculos e resultados experimentais para os espectros de sistemas nos quais se manifestam as simetrias dinâmicas do IBM.

2.3.2 Limite vibracional ($U(5)$)

Escrevendo-se somente os termos da hamiltoniana referentes ao limite vibracional e calculando-se o valor esperado deste operador na base correspondente obtém-se a expressão analítica para a energia:

$$E^I = E_0 + \varepsilon' n_d + \alpha' \frac{1}{2} n_d (n_d - 1) + \beta' [n_d (n_d + 3) - \nu(\nu + 3)] + \gamma' [L(L + 1) - 6n_d], \quad (2.46)$$

estando os coeficientes acima relacionados com aqueles de (2.43) através de:

$$\begin{aligned} \gamma' &= 2\gamma \\ \beta' &= -2\beta \\ \alpha' &= 2(\alpha + 2\beta) \\ \varepsilon' &= \varepsilon + 5\alpha + 8\beta + 12\gamma. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Costuma-se também utilizar formas da hamiltoniana que são equivalentes às anteriores, mas que levam em conta os bósons s e d explicitamente. Seguindo [29] chega-se a

$$\hat{H}^I = \varepsilon' (d^\dagger \cdot \tilde{d}) + \sum_{L=0,2,4} c_L \frac{1}{2} \sqrt{2L+1} \left[[d^\dagger \times d^\dagger]^{(L)} \times [\tilde{d} \times \tilde{d}]^{(L)} \right]_0^{(0)}, \quad (2.48)$$

com as relações entre os coeficientes c_L e as constantes (2.47) dadas por:

$$\begin{aligned} c_0 &= \alpha' + 10\beta' - 12\gamma' \\ c_2 &= \alpha' - 6\gamma' \\ c_4 &= \alpha' + 8\gamma'. \end{aligned} \quad (2.49)$$

Calculando-se o espectro do $^{110}_{48}\text{Cd}_{62}$, exemplo clássico de um núcleo vibracional cujo número de bósons é $N = 7$, obteve-se para as bandas com números quânticos

$(\nu, n_\Delta) = (n_d, 0), (n_d, 1), (n_d - 2, 0)$ os resultados mostrados na tabela (2.1).

Na figura (2.4) mostram-se os espectros experimental e teórico para este núcleo.

2.3.3 Limite rotacional (SU(3))

Para o cálculo do limite rotacional escreve-se a hamiltoniana em termos dos geradores da cadeia (2.22) e calcula-se o valor esperado desse operador na base correspondente, obtendo-se deste modo

$$E^{II} = 2\gamma L(L + 1) + \frac{2}{3} \delta (\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu)). \quad (2.50)$$

banda ($n_d, 0$)	Teoria (MeV)	Experiência(MeV)
0^+	0,000	0,000
2^+	0,722	0,658
2^+	1,402	1,476
4^+	1,542	1,542
3^+	2,160	2,162
4^+	2,240	2,220
6^+	2,460	2,481
banda ($n_d, 1$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	2,0400	2,0787
banda ($n_d - 2, 0$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	1,4730	1,4731
2^+	2,2834	2,2835

Tabela 2.1: Parte do espectro do $^{110}_{48}\text{Cd}_{62}$.

Figura 2.4: Espectro do ^{110}Cd [29] com $N = 7$ bósons. Os parâmetros utilizados foram $\varepsilon' = 0,722$ MeV, $c_0 = 0,029$ MeV, $c_2 = -0,042$ MeV e $c_4 = 0,098$ MeV

Novamente, utilizando uma forma fisicamente mais transparente da hamiltoniana escreve-se

$$\hat{H}^{II} = -\kappa' \hat{L} \cdot \hat{L} - 2\kappa \hat{Q} \cdot \hat{Q}, \quad (2.51)$$

que tem os seguintes autovalores:

$$E^{II} = \left(\frac{3}{4} \kappa - \kappa' \right) L(L+1) - \kappa \left(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu) \right), \quad (2.52)$$

com as seguintes relações entre as constantes:

$$\begin{aligned} \kappa &= -\frac{2}{3} \delta \\ \kappa' &= -\frac{1}{2} \delta - 2\gamma \end{aligned} \quad (2.53)$$

Calculando-se o espectro do $^{156}_{64}\text{Gd}_{92}$, exemplo típico de um núcleo rotacional com $N = 12$ bósons, tem-se para as bandas com $(\lambda, \mu) = (2N, 0), (2N - 4, 2)$ juntamente com os dados experimentais, os resultados mostrados na figura (2.5) e também na tabela (2.2).

Figura 2.5: Espectro do ^{156}Gd , com $N = 12$ bósons. Os parâmetros utilizados foram $\delta = -0,0210$ MeV e $\gamma = 0,0038$ MeV [29].

banda ($2N, 0$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	0,000	0,000
2^+	0,0839	0,0890
4^+	0,2797	0,2881
6^+	0,5875	0,5847
8^+	1,0071	0,9651
10^+	1,5386	1,416
banda ($2N - 4, 2$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	1,0005	1,0495
2^+	1,0844	1,1294
4^+	1,2803	1,2978
2^+	1,0844	1,1541
3^+	1,1683	1,2479
4^+	1,2803	1,3554
5^+	1,4201	1,4763
6^+	1,5880	1,5388

Tabela 2.2: Espectro do $^{156}_{64}\text{Gd}_{92}$.

2.3.4 Limite gama-instável (SO(6))

A hamiltoniana neste limite é escrita como função dos operadores de Casimir da cadeia (2.23); calculando-se os seus valores esperados na base correspondente obtém-se:

$$E^{III} = \frac{1}{4}A[N(N+4) - \sigma(\sigma+4)] + \frac{1}{6}B\tau(\tau+3) + CL(L+1). \quad (2.54)$$

Sistemas γ -instáveis são bem representados pelo comportamento da $^{196}_{78}\text{Pt}_{118}$ que tem $N = 6$ bósons. Mostram-se na figura (2.6) e também na tabela (2.3) os valores obtidos para as bandas com $(\sigma, \tilde{\nu}_\Delta) = (N, 0), (N, 1), (N-2, 0)$ e $(N-4, 0)$, sempre comparados com os dados experimentais. Nota-se neste caso que o ajuste não é tão bom quanto nos casos precedentes. Isto ocorre devido ao efeito da mistura de configurações de duas quasi-partículas na região de baixa energia do espectro [39].

Figura 2.6: Espectro do ^{196}Pt , com $N = 6$ bósons. Os parâmetros utilizados foram $A = 0,171$ MeV e $B = 0,3$ MeV e $C = 0,01\text{MeV}$.

banda ($N, 0$).	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	0,000	0,000
2^+	0,2600	0,3557
2^+	0,5600	0,6887
4^+	0,7000	0,8769
3^+	1,0200	1,0150
4^+	1,1000	1,2933
6^+	1,3200	1,4297
banda ($N, 1$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	0,9000	1,1353
2^+	1,4570	1,3616
2^+	2,0600	1,6773
banda ($N - 2, 0$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	1,1970	1,4027
2^+	1,4600	1,6045
2^+	1,7570	1,8027
banda ($N - 4, 0$)	Teoria (MeV)	Experiência (MeV)
0^+	2,0520	1,8237

Tabela 2.3: Espectro da $^{196}_{78}\text{Pt}_{118}$

2.4 O IBM-2

Uma das críticas ao IBM-1 referia-se ao fato de não haver uma fundamentação microscópica sólida para o modelo. Isto passa a ser possível a partir do momento em que se distinguem os bósons formados por pares de prótons daqueles formados por pares de nêutrons. Como consequência desta distinção, chega-se à segunda versão do modelo, ou IBM-2, cujos pontos principais serão discutidos a seguir.

Algumas questões importantes a respeito da formulação microscópica do IBM surgiram na época de seu desenvolvimento e aqui consideram-se duas delas, notadamente:

- Por que uma aproximação que leva em conta somente bósons s e d funciona tão bem para os estados de mais baixa energia do espectro nuclear?
- Quais os termos mais importantes da hamiltoniana?

Estas questões serão respondidas com a apresentação dos blocos fundamentais do modelo, que são os pares fermiônicos tratados como bósons, partindo-se depois para uma “pinclada” nas técnicas de mapeamento de estados e operadores. Finalmente, faz-se a conexão entre o IBM-2 e o IBM-1 via a importante simetria de F-spin partindo-se para apresentação de dois casos de simetrias dinâmicas que estão relacionadas a este número quântico.

2.4.1 Truncando o modelo de camadas

Conforme tem-se dito neste trabalho *ad nauseam*, a mais importante hipótese do IBM consiste em considerar que os estados coletivos de mais baixa energia de núcleos par-par podem ser descritos por bósons s e d . A partir de cálculos com o modelo de camadas, pode-se determinar os elementos de matriz da interação efetiva entre núcleons idênticos [34]. A figura (2.7) mostra os elementos de matriz para a camada $1g_{9/2}$ para os prótons.

Vê-se que os elementos de matriz são fortemente atrativos quando os dois núcleons estão em um estado com $L = 0$, o que demonstra a bem conhecida importância do emparelhamento nuclear. Mas, além deste fato, a interação permanece ainda atrativa para pares num estado com

Figura 2.7: Elementos de matriz para a camada $1g_{9/2}$ de acordo com um cálculo do modelo de camadas. Note que os estados favorecidos são aqueles com $L = 0$ e $L = 2$

$L = 2$, tornando-se repulsiva para estados com momento angular $L \geq 4$. Conseqüentemente, dois núcleons tendem a formar pares em estados com $L = 0$ e $L = 2$. Mesmo assim, o espaço de Hilbert ainda é grande, como se vê através do exemplo clássico do ^{154}Sm que é um núcleo tipicamente rotacional. Neste sistema, os estados de valência de partícula independente de um próton são $0g_{7/2}$, $1d_{5/2}$, $1d_{3/2}$, $2s_{1/2}$ e $0h_{11/2}$, e aqueles de um nêutron são $0h_{9/2}$, $1f_{7/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{3/2}$, $2p_{1/2}$ e $0i_{13/2}$. Como este núcleo tem 12 prótons e 10 nêutrons nestas camadas de valência, muitos estados podem ser gerados e a dimensão do espaço de Hilbert é da ordem de 4×10^{12} para os estados com momento angular $L = 0^+$. Se os estados com $L = 2^+$ forem considerados, o tamanho deste espaço cresce em uma ordem de grandeza. Faz-se necessário, portanto, o truncamento deste espaço físico para tornar o problema tratável e uma maneira de se fazer isso é construir pares coerentes de núcleons (ou buracos) de valência com $L^\pi = 0^+$ a quem se denomina de pares **S** e aqueles pares com $L^\pi = 2^+$ (pares **D**), que se referem sempre a somente um tipo de partícula, ou seja, pares formados por um próton e um nêutron são descartados no momento.

Os operadores de criação e aniquilação destes pares são dados respectivamente por:

$$S^\dagger = \sum_j \alpha_j \frac{1}{\sqrt{1 + \delta_{j,j'}}} [a_j^\dagger \times a_{j'}^\dagger]_0^{(0)}$$

$$D_M^\dagger = \sum_{jj'} \beta_{jj'} \frac{1}{\sqrt{1 + \delta_{jj'}}} [a_j^\dagger \times a_{j'}^\dagger]_M^2 \quad (2.55)$$

com α e β sendo amplitudes normalizadas escolhidas de tal forma a maximizar a energia de ligação. Deste modo, pode-se construir o estado mais geral deste novo espaço truncado como sendo:

$$(S^\dagger)^{N_S} [(D^\dagger)^{N_D}]_M^L |0\rangle, \quad (2.56)$$

onde $|0\rangle$ representa uma camada fechada, enquanto N_S e N_D contam respectivamente o número de pares com $L = 0^+$ e $L = 2^+$. O número total de pares é $N = N_S + N_D$. O estado mais geral escrito em termos destes pares de núcleons, chamado estado **SD**, tem a seguinte forma:

$$|S^{N_S}, D^{N_D}, L, M, \zeta\rangle \propto \frac{1}{N_F} P(S^\dagger)^{N_S} [(D^\dagger)^{N_D}]_M^L |0\rangle \quad (2.57)$$

sendo N_F uma constante de normalização e P o operador de projeção da senioridade sobre $\nu = 2N_D$.

A primeira aproximação para o estabelecimento microscópico do IBM é assumir que os estados coletivos quadrupolares da parte baixa do espectro são dominados pelos estados **SD** com as devidas amplitudes α e β escolhidas. Desta maneira, trunca-se o espaço de Hilbert original para o subespaço SD . Esta abordagem foi proposta por Arima, Otsuka, Iachello e Talmi [26] devendo-se salientar que os pares em questão referem-se a prótons e nêutrons e são denotados por S_π , D_π e S_ν e D_ν respectivamente. O espaço total é gerado pelo produtos dos espaços de prótons e de nêutrons.

Na seção seguinte discutem-se os princípios da construção do mapeamento dos estados fermiônicos em estados bosônicos.

o

2.4.2 Bósons a partir de férmions

Será apresentado aqui, o mapeamento conhecido na literatura como **OAI** desenvolvido por Otsuka, Arima e Iachello [26].

O estado equivalente ao estado com pares fermiônicos S e D dado pela equação (2.57) no espaço de bósons s e d é

$$|s^{N_s}, d^{N_d}, L, M, \zeta\rangle = \frac{1}{N_B} (s^\dagger)^{N_s} [(d^\dagger)^{N_d}]_M^L |0\rangle, \quad (2.58)$$

com $|0\rangle$ sendo o vácuo bosônico.

Mais especificamente, considerando-se o sistema de muitos corpos como sendo constituído de N pares, mapeia-se uma camada fechada fermiônica naquela bosônica como

$$|0\rangle \rightarrow |0\rangle, \quad (2.59)$$

enquanto a correspondência para um estado S puro é estabelecida via

$$|S^N; L=0\rangle \rightarrow |s^N; L=0\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} (s^\dagger)^N |0\rangle. \quad (2.60)$$

Já os estados com um e dois pares D são dados por

$$\begin{aligned} |S^{N-1}D; L=2\rangle &\rightarrow |s^{N-1}d; L=2\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N-1)!}} (s^\dagger)^{(N-1)} d^\dagger |0\rangle \\ |S^{N-2}D^2; L\rangle &\rightarrow |s^{N-2}d^2; L\rangle = \frac{1}{\sqrt{N(N-2)!}} (s^\dagger)^{(N-2)} [d^\dagger \times d^\dagger]^L |0\rangle, \end{aligned} \quad (2.61)$$

onde, no último caso, os valores permitidos do momento angular são $L = 0, 2, 4$, pois quando se expande o produto tensorial $[D_M^\dagger \times D_{M'}^\dagger]_{M+M'}^L$ em termos dos coeficientes de Clebsch-Gordan utilizando suas propriedades de simetria e, levando-se em conta também o fato dos operadores $D^\dagger$ comutarem entre si, verifica-se que

$$[D^\dagger \times D^\dagger]_M^L = \frac{1}{2} (1 + (-)^L) \sum_{m_1, m_2} C_{m_1, m_2, M}^{22L} D_{m_1}^\dagger D_{m_2}^\dagger, \quad (2.62)$$

que se anula para L ímpar. A discussão para os bósons é análoga. Deve-se dizer que para estados que contém mais de um par de férmions D , o mapeamento deve ser feito com cuidado devido à não ortogonalidade de estados constituídos por múltiplos pares S e D com mesmo momento angular. Deste modo, para um estado com m pares D , sua imagem bosônica é definida como

$$|D^m S^{N-m}; L\rangle_\perp \rightarrow |d^m s^{N-m}; L\rangle; \quad m \leq N, \quad (2.63)$$

onde o símbolo $\perp$ indica a componente do estado que é ortogonal a todos os estados que contém um número menor de pares D .

Os pares de prótons e nêutrons S_π , S_ν , D_π e D_ν são portanto mapeados em bósons com $L = 0$ e $L = 2$, sendo respectivamente denotados por $s_{\pi(\nu)}$ e $d_{\pi(\nu)}$. Este mapeamento estabelece a segunda versão do IBM, chamada de **IBM-2**, onde também o número total de bósons é conservado, sendo $N = N_\pi + N_\nu$, com $N_{\pi(\nu)}$ os pares de valência de prótons (nêutrons).

Na próxima seção a discussão do mapeamento continua, desta vez, com os operadores.

2.4.3 Mapeando os operadores

A imagem bosônica de um operador fermiônico é determinada igualando-se os elementos de matriz de um estado SD de um operador fermiônico com o elemento de matriz correspondente no estado bosônico. Considerando-se os últimos como imagens ϕ e ϕ' dos estados SD correspondentes, Ψ e Ψ' , a imagem bosônica $\hat{O}^B$ de um operador fermiônico $\hat{O}^F$ é obtida de modo a satisfazer

$$(\phi|\hat{O}^B|\phi') \cong \langle\Psi|\hat{O}^F|\Psi'\rangle, \quad (2.64)$$

podendo incluir, em princípio, termos de muitos corpos. Para um dado operador de i -corpos, a imagem bosônica de k -ésima ordem é um operador contendo termos de $k+i$ corpos. Por exemplo, para um operador fermiônico de um corpo, a imagem bosônica correspondente consiste, além do termo de um corpo, de um termo constante. Isto significa que a imagem em ordem zero de uma interação núcleon-núcleon de dois corpos deve conter uma constante, a energia de partícula independente e interações de dois corpos, o que está de acordo com as idéias iniciais do IBM.

Para exemplificar o procedimento, considera-se o caso do operador de quadrupolo elétrico $Q_M = r^2 Y_M^2(\theta, \phi)$ que deve ter a seguinte forma:

$$Q_M \rightarrow (Q_M)_B = q_1(d^\dagger s + s^\dagger \tilde{d}) + q_2(d^\dagger \times \tilde{d})_M^2. \quad (2.65)$$

O valor de q_1 é obtido através do teorema de Wigner-Eckart

$$\begin{aligned}\langle S^{N-1}D; L=2 || Q || S^N; L=0 \rangle &= \langle s^{N-1}d; L=2 || q_1 d^\dagger s || s^N; L=0 \rangle \\ &= q_1 \sqrt{5}N\end{aligned}\tag{2.66}$$

e, analogamente, o valor de q_2 é dado por:

$$q_2 = \frac{\langle S^{N-1}D; L=2 || Q || S^{N-1}D; L=2 \rangle}{\sqrt{5}}.\tag{2.67}$$

O leitor poderá encontrar uma discussão mais detalhada sobre os procedimentos aqui pin- celados em [35].

Tendo sido brevemente apresentado o mapeamento de férmions em bósons, parte-se ago- ra para a construção da hamiltoniana do IBM-2. Para isto, não serão utilizados primeiros princípios e sim argumentos físicos que tornam o problema de muitos corpos nuclear bem mais tratável.

2.5 A hamiltoniana do IBM-2

A hamiltoniana mais geral do IBM-2 contém muitos termos e estudos fenomenológicos tornam-se complicados. No entanto, a estrutura microscópica do modelo sugere que somente alguns destes termos são importantes. Isto ocorre devido ao fato da interação residual no modelo de camadas ser dominada pela parte de emparelhamento entre núcleons idênticos. Outro termo importante é a interação quadrupolo-quadrupolo entre prótons e nêutrons, que dá origem ao termo $\hat{Q}_\pi^\chi \cdot \hat{Q}_\nu^\chi$, responsável pela mistura dos graus de liberdade S e D na função de onda, aumentando desta forma o grau de coletividade na estrutura do espectro. Por último, existe uma energia de simetria, que faz com que estados nos quais prótons e nêutrons movem-se em fase sejam favorecidos. Esta parte é representada pelo operador de Majorana, $M_{\pi\nu}$, que também afeta a posição relativa dos estados com simetrias mistas do IBM-2 em relação aos estados simétricos do IBM-1.

“He is a real nowhere man
sitting in his nowhere land
making all his nowhere plans
for nobody”

Lennon & McCartney

Foi visto no começo da seção (2.4.1) que para núcleons idênticos a interação é fortemente atrativa para pares acoplados em $L = 0$ e também atrativa, mas não de maneira tão proeminente, para pares acoplados a $L = 2$. Devido a esta força atrativa, os núcleons ganham energia quando formam estados de pares $|S\rangle$ e $|D\rangle$. Na hamiltoniana bosônica este fato é descrito considerando-se as energias dos bósons s e d negativas e, em princípio, diferentes para os bósons de prótons (nêutrons)

$$H_0 = \epsilon_{s,\nu} \hat{n}_{s,\nu} + \epsilon_{s,\pi} \hat{n}_{s,\pi} + \epsilon_{d,\nu} \hat{n}_{d,\nu} + \epsilon_{d,\pi} \hat{n}_{d,\pi}. \quad (2.68)$$

Como o número de bósons no IBM é conservado a equação (2.68) é reescrita como:

$$H_0 = E'_0 + \epsilon_\nu \hat{n}_{d,\nu} + \epsilon_\pi \hat{n}_{d,\pi}, \quad (2.69)$$

onde $E'_0 = \epsilon_{s,\nu} \hat{N}_\nu + \epsilon_{s,\pi} \hat{N}_\pi$ e $\hat{N}_\nu$ ($\hat{N}_\pi$) é o número total de bósons de nêutrons (prótons). E também

$$\epsilon_\nu = \epsilon_{d,\nu} - \epsilon_{s,\nu}, \quad \epsilon_\pi = \epsilon_{d,\pi} - \epsilon_{s,\pi}. \quad (2.70)$$

Para um dado núcleo E'_0 é constante e contribui portanto somente para as energias de ligação deste e pode ser desprezada. Como a energia de ligação do bóson s é maior que a do bóson d , ou seja, ϵ_s é mais negativo que ϵ_d , as diferenças dadas pela equação (2.70) são sempre positivas. Finalmente, pode-se escrever H_0 como abaixo:

$$H_0 = \epsilon_\nu (d_\nu^\dagger \cdot \tilde{d}_\nu) + \epsilon_\pi (d_\pi^\dagger \cdot \tilde{d}_\pi). \quad (2.71)$$

Fazendo-se uma análise da interação nêutron-próton através da expansão multipolar [36] chega-se à conclusão que a principal contribuição para a estrutura do espectro vem de $L = 2$. Desta maneira pode-se assumir que esta interação é bem descrita por uma força do tipo quadrupolo-quadrupolo, ou seja:

$$V_{\pi\nu} = \kappa \hat{Q}_\pi \cdot \hat{Q}_\nu, \quad (2.72)$$

onde o operador de quadrupolo é dado por:

$$\hat{Q}_\rho^x = (d_\rho^\dagger \tilde{s}_\rho + s_\rho^\dagger \tilde{d}_\rho) + \chi_\rho (d_\rho^\dagger \times \tilde{d}_\rho)^2 \quad \text{onde } \rho = \pi, \nu. \quad (2.73)$$

A grande diferença entre o IBM-1 e o IBM-2 está no fato de que, no primeiro, todos os estados pertencem à representação mais simétrica $[N]$ de $U(6)$, enquanto que no segundo, outras representações menos simétricas são permitidas, como por exemplo $[N-1, 1]$. Para ajustar do ponto de vista experimental a posição destes estados menos simétricos, lança-se mão do termo de Majorana que afeta a posição daqueles estados com simetria mista em relação aos estados totalmente simétricos. Este termo é escrito como

$$\begin{aligned}\hat{M}_{\pi\nu} = & [s_\nu^\dagger \times d_\pi^\dagger - s_\pi^\dagger \times d_\nu^\dagger]^{(2)} \cdot [\tilde{s}_\nu \times \tilde{d}_\pi - \tilde{s}_\pi \times \tilde{d}_\nu]^{(2)} \\ & - 2 \sum_{k=1,3} [d_\nu^\dagger \times d_\pi^\dagger]^{(k)} \cdot [\tilde{d}_\nu \times \tilde{d}_\pi]^{(k)}.\end{aligned}\quad (2.74)$$

Finalmente, a hamiltoniana do IBM-2 é:

$$\hat{H} = E_0 + \epsilon(\hat{n}_{d\nu} + \hat{n}_{d\pi}) + \kappa \hat{Q}_\pi^\chi \cdot \hat{Q}_\nu^\chi + \lambda' \hat{M}_{\pi\nu} \quad (2.75)$$

Parte-se agora em direção ao estabelecimento de uma correspondência entre as duas versões do modelo, o que é muito importante, pois através desta, podem-se utilizar os cálculos de IBM-1, cujo espaço de configuração é menor, mas com o embasamento microscópico do IBM-2. A conexão entre os dois modelos é feita através da importante simetria de F-spin, discutida a seguir.

2.5.1 A simetria de F-spin

Pode-se verificar que no IBM-2 os estados de mais baixa energia são simétricos mediante a troca de prótons e nêutrons. A esta simetria dá-se o nome de F-spin; deve-se dizer que o papel desta nova simetria é “similar” no caso bosônico àquele desempenhado pela simetria de isospin para os férmions, com o cuidado de lembrar que se tratam de duas coisas totalmente distintas.

Da mesma maneira que se faz com o isospin para os núcleons, pode-se considerar um bóson como um spinor no espaço de F-spin com projeções $\pm \frac{1}{2}$ para bósons de prótons e nêutrons, respectivamente. A estrutura de grupo é idêntica àquela do grupo $SU(2)$, conforme discutido no primeiro capítulo, e os geradores podem ser escritos como

$$\begin{aligned}
F_+ &\equiv s_\pi^\dagger s_\nu + (d_\pi^\dagger \tilde{d}_\nu) \\
F_- &\equiv s_\nu^\dagger s_\pi + (d_\nu^\dagger \tilde{d}_\pi) \\
F_z &\equiv \frac{(N_\pi - N_\nu)}{2},
\end{aligned} \tag{2.76}$$

obedecendo às seguintes relações de comutação:

$$\begin{aligned}
[F_z, F_\pm] &= \pm F_\pm \\
[F_+, F_-] &= 2F_z.
\end{aligned} \tag{2.77}$$

O módulo do operador de F-spin é dado por $\vec{F} \cdot \vec{F} = F_+ F_- + F_z^2 - F_z$ e tem como autovalores $F(F+1)$, que são inteiros ou semi-inteiros dependendo do número de bósons.

Um estado com $N = N_\pi + N_\nu$ bósons é completamente simétrico mediante a troca de bósons de prótons e nêutrons se seu F-spin é máximo e igual à $F_{\text{máx}} = \frac{N}{2}$. Pode-se verificar que um estado s puro é totalmente simétrico, tendo máximo F-spin, aplicando-se o operador $\hat{F}^2$ sobre ele, ou seja,

$$\hat{F}^2 |s_\nu^{N_\nu} s_\pi^{N_\pi}\rangle = \left(\frac{N}{2} + 1\right) \frac{N}{2} |s_\nu^{N_\nu} s_\pi^{N_\pi}\rangle \tag{2.78}$$

Antes da introdução do F-spin, os estados nucleares eram rotulados através do produto das representações $[N_\pi] \times [N_\nu]$, onde $[N]$ é a representação totalmente simétrica de $U(6)$ contendo N bósons. Quando se introduz o F-spin, os estados podem ser rotulados de tal modo que a álgebra de $SU(2)$ associada a este número quântico seja incluída nas cadeias. Neste caso, não somente as representações totalmente simétricas estarão contidas, mas também as demais $[N-1, 1]$, $[N-2, 2]$ que contém diferentes valores de F . Deve-se lembrar que para um dado núcleo o F-spin tem sempre o valor fixo de F_z .

Conclui-se esta seção dizendo que a relação entre os modelos IBM-1 e IBM-2 consiste no fato de poder-se identificar os estados do primeiro, totalmente simétricos, com os estados do segundo que possuem valor máximo de F-spin. Desde que o espaço de configuração do IBM-1

pode ser considerado como um sub-espço do IBM-2, existe uma única maneira de se projetar os operadores do IBM-2 naqueles do IBM-1 e isto é feito usando-se o formalismo de F-spin [36].

Nas próximas seções apresenta-se um pouco da formulação algébrica do IBM-2 dando ênfase às simetrias dinâmicas das cadeias onde o F-spin é um bom número quântico.

2.5.2 Álgebras bosônicas

Pode-se dizer à primeira vista, que a estrutura algébrica do IBM-2 é uma extensão daquela do IBM-1. Isto não deixa de ser verdade, mas deve-se considerar também que no momento em que se começa a explorar suas simetrias dinâmicas, uma variedade muito maior e mais rica de estruturas algébricas ocorrem, sendo então necessária a introdução do conceito de redes algébricas.

Como a álgebra de Lie de $U(6)$, no caso do IBM-1, possui 36 geradores parece natural que a álgebra de Lie do produto direto $G = U_\pi(6) \times U_\nu(6)$ seja gerada por 72 operadores do tipo

$$G_{(\alpha,\beta)}^\rho = b_{\rho,\alpha}^\dagger b_{\rho,\beta}, \quad (2.79)$$

com $(\alpha, \beta = 1, \dots, 6$ e $\rho = \pi, \nu)$.

Analogamente ao caso do IBM-1, o principal problema consiste em reduzir G em $SO(3)$, uma vez que os estados nucleares devem ser caracterizados por bons valores do momento angular.

Como cada uma das álgebras de $U(6)$ possui uma estrutura de sub-álgebras rica, existem vários modos de reduzir $G = U_\pi(6) \otimes U_\nu(6)$ em $SO(3)$, o que origina as chamadas redes algébricas. Um tipo importante destas redes ocorre quando as álgebras de $U_\pi(6)$ e $U_\nu(6)$ são combinadas logo no primeiro passo conforme mostrado a seguir:

$$U_{\pi+\nu}(6) \supset U_{\pi+\nu}(5) \supset O_{\pi+\nu}(5) \supset O_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(2) \quad (2.80)$$

$$U_{\pi+\nu}(6) \supset SU_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(2) \quad (2.81)$$

$$U_{\pi+\nu}(6) \supset O_{\pi+\nu}(6) \supset O_{\pi+\nu}(5) \supset O_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(2), \quad (2.82)$$

com os geradores de $U_{\pi+\nu}(6)$ dados pela soma daqueles de $U_\pi(6)$ e $U_\nu(6)$, ou seja,

$$G_{\pi+\nu}^k(l, l') = G_\pi^k(l, l') + G_\nu^k(l, l'). \quad (2.83)$$

Um segundo tipo importante de rede algébrica ocorre quando as álgebras são acopladas no segundo passo,

$$U_\pi(6) \times U_\nu(6) \supset U_\pi(5) \times U_\nu(5) \rightarrow \quad (2.84)$$

$$\rightarrow U_{\pi+\nu}(5) \supset O_{\pi+\nu}(5) \supset O_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(2)$$

$$U_\pi(6) \times U_\nu(6) \supset SU_\pi(3) \otimes SU_\nu(3) \rightarrow \quad (2.85)$$

$$\rightarrow SU_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(2)$$

$$U_\pi(6) \times U_\nu(6) \supset O_\pi(6) \times O_\nu(6) \rightarrow \quad (2.86)$$

$$\rightarrow O_{\pi+\nu}(6) \supset O_{\pi+\nu}(5) \supset O_{\pi+\nu}(3) \supset O_{\pi+\nu}(2).$$

2.5.3 Bases para sistemas acoplados, base de F-Spin e simetrias dinâmicas do IBM-2

No caso de sistemas acoplados como os que foram mostrados, ou seja, que apresentam uma estrutura algébrica do tipo $G = G_1 \times G_2$, a maneira de se construir as bases é feita através do produto de Kronecker das representações $[f_1]$ de G_1 e $[f_2]$ de G_2 , pictoricamente indicado como:

$$[f] = [f_1] \times [f_2]. \quad (2.87)$$

As regras de como se pode construir estes produtos são discutidas em [13]. A seguir, apresenta-se o procedimento algébrico para as chamadas bases de F-spin.

Quando se está interessado em estudar as simetrias dinâmicas do modelo é mais apropriada a utilização das cadeias das equações (2.80), (2.81) e (2.82) que são chamadas de bases de F-spin. Para a construção dessas bases é necessário efetuar o produto de Kronecker de duas representações irredutíveis de $U(6)$ e, como estas irreps são totalmente simétricas, pode-se

escrever:

$$[N_\pi] \otimes [N_\nu] = \oplus \sum_{k=0}^{\min(N_\pi, N_\nu)} (N_\pi + N_\nu - k, k). \quad (2.88)$$

Ao invés de se utilizar os números quânticos N_π e N_ν , pode-se fazer uso das seguintes quantidades:

$$\begin{aligned} F &= \frac{N_\pi - N_\nu}{2} = \frac{N}{2} - N_\nu, \\ N &= N_\pi + N_\nu. \end{aligned} \quad (2.89)$$

É muito importante dizer que a ocorrência de estados que não são totalmente simétricos no espectro deve-se ao acoplamento entre prótons e nêutrons. Logo, pode-se esperar que a redução de $U_{\pi+\nu}(6)$ em seus subgrupos envolva aquela que foi feita para estados totalmente simétricos, que são os únicos que ocorrem no IBM-1. As regras de ramificação para as cadeias da base de F-spin podem ser encontradas com detalhes em [29].

As simetrias dinâmicas do IBM-2 são construídas da mesma forma que no IBM-1 através da expansão da hamiltoniana em termos dos invariantes de Casimir de uma dada cadeia. No caso de prótons e nêutrons acoplados, os geradores G dessas cadeias são substituídos pelos correspondentes $G_\pi + G_\nu$. O operador de Majorana (2.73) é bastante útil nesses casos, pois se relaciona com o operador quadrático de Casimir de $U_{\pi+\nu}(6)$ através da seguinte relação:

$$\hat{M}_{\pi\nu} = \frac{1}{2}(\hat{N}(\hat{N} + 5) - C_2(U_{\pi+\nu}(6))). \quad (2.90)$$

Como exemplo de uma cadeia simétrica em F-spin, tem-se, por exemplo, a cadeia (2.80). A hamiltoniana construída a partir dos operadores de Casimir dessa cadeia é escrita como:

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(11)} &= E_0 + aC_1(U_{\pi+\nu}(6)) + a'C_2(U_{\pi+\nu}(6)) + \varepsilon C_1(U_{\pi+\nu}(5)) + \\ &+ \alpha C_2(U_{\pi+\nu}(5)) + \beta C_2(O_{\pi+\nu}(5)) + \gamma C_2(O_{\pi+\nu}(3)), \end{aligned} \quad (2.91)$$

sendo seus autovalores dados por:

$$\begin{aligned}
E^{(11)} = & E_0 + a(N_1 + N_2) + a'[N_1(N_1 + 5) + N_2(N_2 + 3)] + \\
& + \varepsilon(n_1 + n_2) + \alpha[n_1(n_1 + 4) + n_2(n_2 + 2)] + \\
& + 2\beta[\nu_1(\nu_1 + 3) + \nu_2(\nu_2 + 1)] + 2\gamma L(L + 1).
\end{aligned} \tag{2.92}$$

Alguns estados correspondentes a estes autovalores são mostrados na figura (2.8) [29]. Para

Figura 2.8: Espectro com a simetria $U_{\pi+\nu}(6) \supset U_{\pi+\nu}(5)$ com $N_\pi = 2$ e $N_\nu = 1$.

a cadeia (2.84), o procedimento é o mesmo e sua hamiltoniana em termos dos invariantes de Casimir é:

$$\begin{aligned}
\hat{H}^{(12)} = & E_0 + a_\pi C_1(U_\pi(5)) + a_\nu C_1(U_\nu(5)) + a'_\pi C_2(U_\pi(5)) \\
& + a'_\nu C_2(U_\nu(5)) + \varepsilon C_1(U_{\pi+\nu}(5)) + \alpha C_2(U_{\pi+\nu}(5)) \\
& + \beta C_2(O_{\pi+\nu}(5)) + \gamma C_2(O_{\pi+\nu}(3)),
\end{aligned} \tag{2.93}$$

com os seguintes autovalores:

$$\begin{aligned}
E^{(12)} = & E_0 + a_\pi n_{d_\pi} + a_\nu n_{d_\nu} + a'_\pi[n_{d_\pi}(n_{d_\pi} + 4)] + a'_\nu[n_{d_\nu}(n_{d_\nu} + 4)] + \\
& + \varepsilon(n_1 + n_2) + \alpha[n_1(n_1 + 4) + n_2(n_2 + 2)] + \\
& + 2\beta[\nu_1(\nu_1 + 3) + \nu_2(\nu_2 + 1)] + 2\gamma L(L + 1).
\end{aligned} \tag{2.94}$$

O espectro correspondente à equação acima é mostrado na figura (2.9):

Figura 2.9: Espectro com a simetria $U_{\pi+\nu}(6) \supset SU_{\pi+\nu}(3)$ com $N_\pi = 2$ e $N_\nu = 1$.

2.6 Resumo

Foram apresentados neste capítulo aspectos teóricos do modelo de bósons interatuantes em suas duas primeiras versões. Dada a extensão do assunto e ao fato deste trabalho utilizar as simetrias dinâmicas do modelo com o intuito de calcular as energias de ligação de núcleos com $N = Z$, optou-se por dar mais ênfase a esta parte na apresentação do IBM-1, enquanto que a discussão do IBM-2 foi motivada pela necessidade da justificação microscópica do modelo. Tentou-se dar uma idéia de como são aplicadas as complicadas técnicas de bosonização, através de um exemplo canônico e ainda, a importância da simetria de F-Spin como intermediária das relações entre o IBM-2 e IBM-1 foi ressaltada.

No capítulo seguinte serão discutidas as versões invariantes por isospin do IBM que são fundamentais no tratamento de núcleos com $N = Z$. Deste modo, o terreno estará sendo preparado para a apresentação do modelo que propusemos.

Capítulo 3

Versões invariantes em isospin

3.1 Introdução

Até o momento foi visto que o IBM estabelece-se como um modelo intermediário entre o modelo de camadas e o modelo coletivo de Bohr. Se por um lado ele pode ser tratado como uma alternativa algébrica para a solução da hamiltoniana coletiva, por outro, associando-se bósons aos pares fermiônicos, é possível transformar um problema extremamente complicado de núcleons interagindo em uma camada não fechada em um problema mais simples de bósons interagentes restringindo-se desta forma drasticamente o espaço de configuração do problema nuclear de muitos corpos.

No IBM-1, as idéias básicas desta restrição para núcleos par-pares, consistem em *Considerar o caroço nuclear inerte; dizer que as configurações relevantes são aquelas geradas pelos núcleons de valência e tratá-los como pares fermiônicos correlacionados em estados com $J^\pi = 0^+, 2^+$ e, finalmente, considerá-los como bósons.*

Estas condições podem ser relaxadas e são muitos os trabalhos que tratam excitações do caroço [37], com pares com $J^\pi = 4^+$ [38], e pares tratados explicitamente como férmions [39].

No IBM-2, as mesmas aproximações são consideradas, mas agora levam-se em conta os bósons formados por pares de prótons e aqueles constituídos por nêutrons, em estados de momento angular e paridade $J^\pi = 0^+, 2^+$. Usualmente denota-se tais bósons como nn e pp e

são estabelecidos os fundamentos microscópicos do IBM através das técnicas de mapeamento desenvolvidas por Otsuka, Arima e Iachello.

Quando os prótons e nêutrons ocupam os mesmos orbitais de valência deve-se construir, também, bósons formados por pares próton-nêutron. Uma consequência imediata é que, agora, núcleos com $N = Z$ também passam a fazer parte do escopo do IBM. Chega-se então às versões três e quatro do modelo, ambas invariantes em isospin, sendo que a primeira leva em conta os bósons com tripleto de isospin $T = 1$, enquanto que a segunda vai mais além, incluindo os bósons com $T = 0$. Este capítulo é devotado ao estudo destas duas versões. A estrutura desenvolvida anteriormente é mantida, ou seja, são mostrados os aspectos gerais do modelo, aliados aos aspectos algébricos com alguns exemplos. O IBM-3 é apresentado *en passant* e uma seção é devotada à importante simetria de $SU(4)$ antes da apresentação do IBM-4.

3.2 O IBM-3

No IBM-3 [27] os bósons constituintes são formados por três tipos de pares: nn , pp , e np , sendo o último chamado de bóson δ . Os primeiros, pp e nn , correspondem a pares fermiônicos com $T = 1$ e $T_z = \pm 1$, enquanto que os bósons δ têm $T = 1$, $T_z = 0$. Portanto, os bósons do IBM-3 incluem todo tripleto de $T = 1$, o que não acontece no IBM-2. Constrói-se, desta feita, a versão invariante por isospin do modelo de bósons interatuantes. Como antes, os bósons δ carregam momento angular $J^\pi = 0^+, 2^+$. Em uma notação mais clara, em termos do isospin e sua projeção, pode-se escrever

$$\begin{aligned} |\pi\rangle &= |pp\rangle = |1, +1\rangle, \\ |\delta\rangle &= |pn\rangle = |1, 0\rangle, \\ |\nu\rangle &= |nn\rangle = |1, -1\rangle. \end{aligned} \tag{3.1}$$

Os operadores bosônicos são definidos similarmente ao caso do IBM-1,

$$b_{\rho,l,m}^\dagger, b_{\rho,l,m}$$

$$(\rho = \pi, \nu, \delta; l = 0, 2; -l \leq m \leq +l), \quad (3.2)$$

sendo as relações de comutação dadas por:

$$\begin{aligned} [b_{\rho,l,m}, b_{\rho',l',m'}^\dagger] &= \delta_{\rho,\rho'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'} \\ [b_{\rho,l,m}, b_{\rho',l',m'}] &= [b_{\rho,l,m}^\dagger, b_{\rho',l',m'}^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Mais uma vez, são utilizados operadores que se transformam como tensores esféricos sob rotações,

$$\tilde{s}_\rho = s_\rho; \tilde{d}_{\rho,\mu} = (-)^\mu d_{\rho,-\mu}, \quad (3.4)$$

com $\rho = \pi, \nu, \delta$.

3.2.1 Álgebras bosônicas

O espaço bosônico do IBM-3 é construído a partir dos três tipos de bósons mencionados acima, tendo cada um seis componentes. Portanto, os estados de N bósons geram um espaço vetorial no qual a representação simétrica $[N]$ é aquela de $U(18)$. A classificação que conserva o momento angular e o isospin em termos das álgebras é dada por

$$U(18) \supset \{U_L(6) \supset \dots \supset SO_L(3)\} \otimes \{U_T(3) \supset SU_T(3) \supset SU_T(2)\}; \quad (3.5)$$

aqui o pontilhado, (...), representa cada um dos possíveis limites do IBM-1, ou seja, vibracional, rotacional ou γ -instável. A simetria global da função de onda N -bosônica requer que as representações de $U_L(6)$ e $U_T(3)$ sejam idênticas e rotuladas por $[N_1, N_2, N_3]$, onde $N = N_1 + N_2 + N_3$. Isto implica que as representações permitidas de $U_L(6)$ podem ter até três colunas, contrariamente ao IBM-1, no qual as representações são necessariamente simétricas, e ao IBM-2 no qual elas possuem até duas colunas. Usualmente denota-se as representações de $SU_T(3)$ em termos dos números quânticos de Elliot,

$$\begin{aligned} \lambda &= N_1 - N_2, \\ \mu &= N_2 - N_3. \end{aligned} \quad (3.6)$$

N	$[N_1, N_2, N_3]$	(λ, μ)	K	T
1	[1]	(1,0)	0	1
2	[2]	(2,0)	0	0,2
	[11]	(0,1)	0	1
3	[3]	(3,0)	0	1,3
	[2,1]	(1,1)	1	1,2
	[1,1,1]	(0,0)	0	0
4	[4]	(4,0)	0	0,2,4
	[3,1]	(2,1)	1	1,2,3
	[2,2]	(0,2)	0	0,2
	[2,1,1]	(1,0)	0	1

Tabela 3.1: Classificação para os estados bosônicos do IBM-3, em seus estados de spin e isospin.

Os valores de T para os bósons são determinados usando-se a redução usual de $SU(3)$ já discutida no segundo capítulo e novamente mostrada abaixo:

$$K = \min\{\lambda, \mu\}, \min\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 1 \text{ ou } 0, \quad (3.7)$$

$$T = K, K + 1, K + 2, \dots, K + \max\{\lambda, \mu\}, \quad (3.8)$$

com exceção de $K = 0$, quando vale:

$$T = \max\{\lambda, \mu\}, \max\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 1 \text{ ou } 0 \quad (3.9)$$

Para efeito de ilustração mostra-se na tabela (3.1) uma classificação parcial para os bósons do IBM-3.

Núcleos com $N \approx Z$ possuem os números de prótons e nêutrons comparáveis nos orbitais de valência e pode-se esperar que em baixas energias a contribuição dos bósons δ seja importante.

Contudo, à medida que cresce o excesso de prótons ou de nêutrons estes bósons deixam de ser importantes devido ao curto alcance da interação de emparelhamento.

O estabelecimento de um modelo invariante por isospin, como o IBM-3, tem a vantagem de fazer a hamiltoniana bosônica adquirir uma forma mais simples pois o número de elementos de matriz independentes é reduzido em relação ao caso onde essa simetria não é levada em conta. Isto faz com que o número de parâmetros das três versões do IBM sejam comparáveis [48]. Muito embora a hamiltoniana tenha uma forma mais simples, o espectro do IBM-3 é mais rico do que aquele gerado pela hamiltoniana do IBM-1, pois, apesar da função de onda total (bosônica) ser simétrica, as partes orbital e de spin-isospin não precisam sê-lo, e outros tipos de espectros podem ocorrer.

Outro ponto importante que merece ser mencionado em relação à conservação do isospin no IBM-3, refere-se ao seu mapeamento no modelo de camadas. No mapeamento de Otsuka, Arima e Iachello, a idéia principal, conforme visto no capítulo anterior, é identificar os vários números quânticos nos dois modelos e estabelecer uma conexão entre eles. Se a hamiltoniana do modelo for rotacionalmente invariante tanto no espaço fermiônico como no bosônico, por exemplo, as autofunções resultantes terão bom momento angular e este número quântico poderá ser usado para se estabelecer uma correspondência entre os dois modelos. Obviamente, esta é uma discussão simplificada de um problema muito mais complexo.

Em resumo, uma grande vantagem do IBM-3 em relação às versões anteriores é que o isospin, além da senioridade e momento angular, pode ser usado para estabelecer a correspondência entre o modelo de camadas e o modelo de bósons interagentes. A interação próton-nêutron em estados de $T = 0$ é simulada fazendo-se a interação bóson-bóson dependente do isospin. Esta dependência faz com que sejam incorporados ao modelo efeitos da simetria de supermultipletos, na medida em que estados com isospin mínimo sejam trazidos para baixo no espectro [27].

É desejável uma formulação onde os bósons com $T = 0$ sejam tratados em igualdade com relação a aqueles com $T = 1$. Desta necessidade foi desenvolvida uma nova versão invariante por isospin, que seguindo a tradição recebeu o nome de IBM-4. Esta versão incorpora a importante

simetria de $SU(4)$ estudada primeiramente por Wigner [7] e que será discutida a seguir.

3.3 A simetria de $SU(4)$

Logo após a descoberta do nêutron por Chadwick, Heisenberg propôs a idéia da simetria de isospin no núcleo [40]. Um dos fatos que levaram ao estabelecimento desta simetria consiste na igualdade aproximada das massas do nêutron e do próton, além da independência de carga da força nuclear. Matematicamente, pode-se levar adiante esta idéia de maneira muito elegante assumindo que o núcleon tem isospin $T = \frac{1}{2}$ com projeções $T_z = \pm \frac{1}{2}$ para seus dois estados de carga, ou seja, o próton e o nêutron. Embora esta seja uma idéia simples, suas conseqüências na classificação dos estados nucleares foram profundas na física nuclear da primeira metade do século XX .

Os geradores de isospin são definidos como:

$$\vec{T} = \frac{1}{2} \sum_i \vec{\tau}(i), \quad (3.10)$$

onde $\vec{\tau}$ são as matrizes de Pauli atuando no espaço de isospin. A somatória estende-se sobre todas as partículas do núcleo.

A simetria de isospin, conforme visto no primeiro capítulo, ocorre se

$$[\hat{H}, \vec{T}] = 0. \quad (3.11)$$

Os autoestados da hamiltoniana nuclear são dessa forma caracterizados pelo isospin total T e sua projeção T_z sendo os estados com mesmo isospin, degenerados. Tal degenerescência pode ser quebrada via a interação coulombiana entre os prótons pois

$$[\hat{H}_{Coulomb}, \hat{T}_{\pm}] \neq 0. \quad (3.12)$$

A força de Coulomb quebra a simetria de isospin de maneira dinâmica, ou seja, a degenerescência é quebrada, mas o isospin permanece aproximadamente um número quântico

adequado para rotular os autoestados ¹.

Algum tempo depois da proposta de Heisenberg, Wigner [7] e independentemente Hund [41], propuseram a extensão dessas idéias através da hipótese de invariância das forças nucleares sob transformações de spin e isospin de acordo com

$$[\hat{H}, \vec{T}] = [\hat{H}, \vec{S}] = [\hat{H}, \vec{Y}] = 0. \quad (3.13)$$

$\vec{S} = \frac{1}{2} \sum_i \vec{\sigma}(i)$ é o spin total e o operador de Gamow-Teller, $\vec{Y} = \frac{1}{2} \sum_i \vec{\sigma}(i) \vec{\tau}(i)$, é um dos geradores de $SU(4)$, além de estar relacionado com as transições β que devem ocorrer somente dentro de um supermultiplete [43].

Os autoestados da hamiltoniana nuclear que satisfazem as invariâncias (3.13) são classificados pelos seguintes rótulos:

$$|(\lambda\mu\nu)LSJM_JTM_T\rangle. \quad (3.14)$$

Os números quânticos $(\lambda\mu\nu)$ estão associados à álgebra de spin-isospin $SU(4)$ gerada por $\vec{S}$, $\vec{T}$ e $\vec{Y}$ e são muito importantes no trabalho de Wigner.

Levando-se em conta as invariâncias expressas em (3.13) pode-se escrever a função de onda de um dado núcleo como o produto de uma parte que depende somente das coordenadas espaciais e de outra, cuja dependência é nas coordenadas de spin-isopin:

$$\Psi(1, \dots, A) = \sum_{M_L M_S} C_{M_L M_S M_J}^{LSJ} \Phi_{LM_L}(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A) \Phi_{TM_T SM_S}(1, \dots, A). \quad (3.15)$$

Tomando o exemplo de duas partículas, a parte espacial da função de onda pode ser simétrica enquanto a parte de spin-isospin será antissimétrica ou vice-versa, pois é a função de onda total, $\Psi(1, \dots, A)$, que deve ser antissimétrica. Neste caso, os números quânticos $(\lambda\mu\nu)$ assumem os valores (010) e (200) nos casos espacialmente simétrico e antissimétrico, respectivamente. Generalizando para muitas partículas, verifica-se que os números $(\lambda\mu\nu)$ especificam a maneira como a antissimetria total se manifesta através das propriedades de simetria das partes espacial e de spin-isopin da função de onda do núcleo.

¹Para uma discussão aprofundada acerca da permanência do isospin como número quântico deve-se recorrer à referência [42].

Devido ao curto alcance da interação residual de emparelhamento, os estados espacialmente simétricos são favorecidos energeticamente. Pode-se ver este fato calculando-se os elementos de matriz de uma força delta para os dois casos acima, ou seja $(\lambda\mu\nu) = (200)$ e (010) ,

$$\begin{aligned}\langle(200)LSJM_JTM_T|\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|(200)LSJM_JTM_T\rangle &= 0; \\ \langle(010)LSJM_JTM_T|\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)|(010)LSJM_JTM_T\rangle &\leq 0.\end{aligned}\quad (3.16)$$

No primeiro caso os elementos de matriz são nulos e no caso espacialmente simétrico a interação é atrativa. Este resultado pode ser generalizado para um sistema de A partículas através do uso do operador $\sum_{i \leq j} P_{ij}$, onde

$$P_{ij}\Psi(..., \vec{r}_i, ..., \vec{r}_j, ...) = \pm \Psi(..., \vec{r}_j, ..., \vec{r}_i, ...), \quad (3.17)$$

mede a simetria da parte espacial da função de onda resultando em ± 1 nos casos simétrico e anti-simétrico, respectivamente.

Para um sistema com A núcleons os autovalores do operador $\hat{C}_2[SU(4)]$ são dados por

$$a + bg(\lambda\mu\nu), \quad (3.18)$$

sendo $g(\lambda\mu\nu)$ o autovalor do operador de Casimir de segunda ordem de $SU(4)$, mostrado na equação (3.19) abaixo:

$$g(\lambda\mu\nu) = 3\lambda(\lambda + 4) + 3\nu(\nu + 4) + 4\mu(\mu + 4) + 4\mu(\lambda + \nu) + 2\lambda\nu. \quad (3.19)$$

Os coeficientes a e b dependem suavemente da massa A .

3.3.1 Considerações sobre a simetria de $SU(4)$ e energias de ligação.

Para testar o efeito da simetria de $SU(4)$ nas energias de ligação nucleares assume-se que o estado fundamental de um dado núcleo tem $T = T_z = \frac{1}{2}|N - Z|$, com uma possível exceção para os núcleos ímpar-ímpares com $N = Z$. A partir deste fato trabalha-se com os valores de $(\lambda\mu\nu)$ que maximizam a simetria espacial (minimizam o autovalor $g(\lambda\mu\nu)$) e que são compatíveis com

os valores de T . Ou seja, de acordo com a teoria de Wigner para os supermultipletos, a energia de ligação de um dado núcleo é expressa através de

$$B(N, Z) = a + bg(\lambda\mu\nu). \quad (3.20)$$

Os rótulos $(\lambda\mu\nu)$ determinam qual a representação de $SU(4)$ é favorecida. Observe que tais representações dependem somente do isospin do estado fundamental de um dado sistema,

$$(\lambda\mu\nu) = \begin{cases} (0T0), N \text{ e } Z \text{ pares} \\ (1, T - \frac{1}{2}, 0), N \text{ par e } Z \text{ ímpar} \\ (0, T - \frac{1}{2}, 1), N \text{ ímpar e } Z \text{ par} \\ (010), N = Z \text{ ímpares} \\ (1, T - 1, 1), N \neq Z \text{ ímpares.} \end{cases} \quad (3.21)$$

Em 1963, Franzini e Radicati [44] sugeriram a utilização da razão $R(T_z)$ entre diferenças de massas envolvendo quatro análogos isobáricos com diferentes projeções T_z como um teste da influência da simetria de $SU(4)$ nos núcleos. Os resultados obtidos mostravam que até $A \approx 110$ havia concordância com as previsões de $SU(4)$. Contudo, algum tempo mais tarde foi mostrado [45] que $R(T_z)$ não era muito sensível à quebra desta simetria e, portanto, não poderia ser um bom teste para sua validade. Mais recentemente [46], sugeriu-se uma combinação diferente das massas nucleares com o intuito de testar a manifestação da simetria de $SU(4)$ nos núcleos, conforme será discutido a seguir.

Considere a dupla diferença de energias de ligação para núcleos par-pares, utilizada para extrair a intensidade da interação empírica próton-nêutron (np) do último próton com o último nêutron [47]:

$$\delta V_{np} \equiv \frac{1}{4}[(B(N, Z) - B(N - 2, Z)) + (B(N - 2, Z - 2) - B(N, Z - 2))]. \quad (3.22)$$

A mais importante característica desta combinação é o aumento de $|\delta V_{np}|$ para núcleos com $N = Z$ o que pode ser entendido como uma consequência da manifestação da simetria $SU(4)$ de Wigner; além do mais, o grau deste aumento é um teste para a qualidade da simetria.

Mostra-se na figura (3.1) - extraída da referência [46] - as quantidades (3.22) para núcleos par-pares da camada *sd*. Nesta figura, para $N \neq Z$ a intensidade da interação δV_{np} é aproximadamente constante e da ordem de 1 MeV e o aumento desta quantidade para $N = Z$ é evidente. Em termos da teoria dos supermultipletos de Wigner, a representação favorecida para sistemas par-pares é aquela com $(\lambda\mu\nu) = (0T0)$, onde T é o isospin do estado fundamental. De acordo com (3.20) a energia de ligação é dada por $B(N, Z) = a + bg(0T0)$ e, assumindo-se que os coeficientes a e b são constantes para os quatro núcleos da equação (3.22), encontra-se uma expressão simples para δV_{np} :

$$\delta V_{np}/b = \begin{cases} \frac{1}{4}[g(000) - g(010) - g(010) + g(000)] = -10 & \text{para } N = Z \\ \frac{1}{4}[g(0T0) - g(0, T-1, 0) - g(0, T+1, 0) + g(0T0)] = -2 & \text{para } N \neq Z \end{cases} \quad (3.23)$$

Figura 3.1: Representação das diferenças duplas de energias de ligação. Caso (a) Núcleos par-pares da camada *sd*. Caso (b) Predições do modelo de Wigner

Conclui-se, portanto, que o modelo $SU(4)$ de Wigner em sua forma mais simples, ou seja, sem quebra de simetria, prediz que a intensidade da interação próton-nêutron é cinco vezes maior para núcleos $N = Z$ com relação àqueles sistemas onde $N \neq Z$. Este tipo de estudo, quando utilizado na construção de uma fórmula de massa que contenha algum termo adicional representando o emparelhamento próton-nêutron, tem duas consequências imediatas. Primeira:

núcleos com $N \approx Z$ têm propriedades peculiares que tornam necessário um termo de Wigner nas fórmulas de massa. Segunda: a partir da análise feita com as duplas diferenças de energias de ligação, fica aparente que a interação de Wigner, expressa por $\hat{C}_2[SU(4)]$, dá conta dessas propriedades peculiares de sistemas com $N \approx Z$, mesmo estando claro da figura (3.1) que existem desvios dos dados experimentais em relação às predições simples do modelo. Conclui-se então que a introdução de um termo de Wigner em fórmulas de massas indica um caminho para a descrição adequada de núcleos com o mesmo número de prótons e nêutrons.

3.4 O IBM-4

No IBM-3 os bósons considerados para a construção dos estados fisicamente relevantes têm isospin $T = 1$ e carregam momento angular $J = 0$ e $J = 2$ ². Levando-se em consideração núcleos ímpar-ímpares verifica-se que pares com isospin $T = 0$ são necessários para sua descrição adequada. Um exemplo experimental da época em que esta versão do IBM foi elaborada que corrobora a afirmação anterior é o ^{18}F , cujo espectro contém entre seus níveis energeticamente mais baixos estados com as seguintes combinações: $(J, T) = (0, 1), (2, 1), (1, 0), (2, 0), (3, 0)$.

A atribuição do momento angular para bósons com isospin $T = 0$ não é tão transparente como nas versões anteriores do modelo. Elliot e Evans [28] assumem que os bósons, tanto os com $T = 0$ quanto aqueles com $T = 1$ carregam, *momento angular orbital* $L = 0$ e $L = 2$. Desta forma, os bósons com $T = 0$ têm um *spin intrínseco* $S = 1$, enquanto aqueles com $T = 1$ têm spin $S = 0$. Pode-se entender este fato levando-se em consideração dois núcleons em um orbital $l = 0, 2$; os estados possíveis terão, devido à antissimetria da função de onda total, momento angular $J = 0, 2$ com $T = 1, S = 0$ ou $J = 1^2, 2, 3, T = 0$ e $S = 1$. Pode-se escrever então

$$b_{L, M_L, S, M_S, T, M_T}^\dagger \text{ com } (LST) = (001), (010), (201), (210), \quad (3.24)$$

²Aqui passa-se a utilizar J para o momento angular total ao invés de L , que agora denota o momento angular orbital.

ou ainda, em uma notação mais clara,

$$b_{(L,S)JM_J,T,M_T}^\dagger, \quad (3.25)$$

onde $J = 0, 2$ no caso isovetorial ($T = 1$) e $J = 1^2, 2, 3$ no canal isoescalar ($T = 0$) com $M_J = -J, \dots, +J$ e $M_T = -T, \dots, +T$.

Os 36 operadores bosônicos do IBM-4 são representados através da notação espectroscópica $^{2S+1}L_J$ como

$$\begin{aligned} T = 1 : & \quad ^1s_0, ^1d_2, \\ T = 0 : & \quad ^3s_1, ^3d_1, ^3d_2, ^3d_3. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Esta escolha para os operadores bosônicos leva a uma classificação algébrica que contém a álgebra $SU(4)$ de Wigner discutida na seção anterior. Tanto este *spin intrínseco* como o momento angular orbital dos bósons não têm relação com o spin e o momento angular dos pares fermiônicos que os representam.

A decomposição do IBM-4 que conserva o momento angular orbital, o spin intrínseco e o isospin é:

$$U(36) \supset \{U_L(6) \supset \dots \supset SO_L(3)\} \otimes \{U_{ST}(6) \supset SU_{ST}(4) \supset SU_S(2) \otimes SU_T(2)\}, \quad (3.27)$$

sendo os números quânticos associados à parte de spin-isospin desta cadeia (o segundo termo entre chaves na expressão acima) dados por:

$$|[N_1 \dots N_6], [n_1 \dots n_4], S, T\rangle. \quad (3.28)$$

^a Mais uma vez, a simetria global da função de onda N-bosônica requer que as representações de $U_L(6)$ e $U_{ST}(6)$ sejam idênticas e rotuladas por $[N_1 \dots N_6]$. Isto implica que as representações permitidas de $U_L(6)$ podem ter até seis linhas. Para $SU_{ST}(4)$ costuma-se usar a notação de Elliot ao invés da tabela de Young $[n_1 \dots n_4]$. Como antes,

$$\lambda = n_1 - n_2,$$

$$\mu = n_2 - n_3, \quad (3.29)$$

$$\nu = n_3 - n_4.$$

Com o intuito de deixar a discussão mais clara, mostra-se na tabela (3.2) a classificação de estados com $N = 3$ bósons proveniente da cadeia $U_{ST}(6) \supset SU_{ST}(4) \supset SU_S(2) \otimes SU_T(2)$.

	$U(6)$	$U(4)$	$SU(4)$		
N		$[n_1 n_2 n_3 n_4]$	$(\lambda \mu \nu)$	$g(\lambda \mu \nu)$	(TS)
1	[1]	[11]	(010)	20	(01),(10)
2	[2]	[1111]	(000)	0	(00)
		[22]	(020)	48	(00),(02),(11),(20)
	[11]	[211]	(101)	32	(01),(10),(11)
3	[3]	[2211]	(010)	20	(01),(10)
		[33]	(030)	84	(01),(03),(10),(12),(21),(30)
	[21]	[2211]	(010)	20	(01),(10)
		[321]	(111)	60	(01),(02),(10),(11) ² ,(12),(20),(21)
	[111]	[3111]	(200)	36	(00),(11)
		[222]	(002)	36	(00),(11)

Tabela 3.2: Classificação em isospin-spin para os estados bosônicos do IBM-4 para até 3 bósons

Devido à simetria da função de onda bosônica as representações de $U_L(6)$ e de $U_{ST}(6)$ são idênticas e as reduções da parte orbital em configurações $s^k d^{N-k}$ são as mesmas que as reduções do IBM-3.

Do ponto de vista prático, os estados relevantes são aqueles que têm energia mais baixa e, de acordo com a referência [28], são aqueles que têm o menor autovalor do operador de Casimir de $SU(4)$. Pode-se, de fato, ver da tabela (3.2) que o grupo de estados para os núcleos par-pares ($N - T \rightarrow \text{par}$) tem os níveis rotulados pelos estados $[[N](0T0)S = 0]$ com os mesmos valores

do momento angular do IBM-1, ou seja $J = (02), (024), (2346), \dots$. Contudo, deve-se dizer que estes estados não são compostos exclusivamente por bósons com $S = 0$, com exceção daquele com valor máximo do isospin ($T = N$). Quando dois estados têm os mesmo rótulo de $SU(4)$, assume-se que aquele que tem maior simetria em $U(6)$ é o que tem energia mais baixa. Do mesmo modo, para núcleos ímpar-ímpares ($N - T \rightarrow$ ímpar) o ordenamento em $SU(4)$ dos estados mais baixos em energia favorece aqueles com rótulos $[[N - 1, 1](1, T - 1, 1)S = 0, 1]$ com o momento angular dado por $J = (2), (13), (024), (12^2345), (02345), \dots$, com exceção de estados com $T = 0$ quando os rótulos são $[[N](010)S = 1]$ com o mesmos valores de J do que os núcleos par-pares.

3.4.1 Algumas simetrias dinâmicas do IBM-4

Assim como as versões anteriores do modelo, o IBM-4 também apresenta simetrias dinâmicas. Existem algumas maneiras de se reduzir $U(36)$ ao grupo de invariância $SO_J(3) \otimes SO_T(3)$, uma vez que neste caso, além do momento angular total, deseja-se também que o isospin seja um bom número quântico. Recentemente estes desmembramentos foram efetuados [50] e aqui são apresentados somente as cadeias que preservam o acoplamento spin-órbita ³

$$\begin{aligned}
U(36) &\supset [U_L(6) \supset \dots \supset SO_L(3)] \otimes \\
&[U_{ST}(6) \supset SU_S(3) \otimes SU_T(3) \supset SO_S(3) \otimes SO_T(3)] \supset SO_J(3) \otimes SO_T(3), \\
\\
U(36) &\supset [U_L(6) \supset \dots \supset SO_L(3)] \otimes \\
&[U_{ST}(6) \supset SO_{ST}(6) \approx SU_{ST}(4) \supset SO_S(3) \otimes SO_T(3)] \supset SO_J(3) \otimes SO_T(3), \quad (3.30)
\end{aligned}$$

Como nos casos anteriores, os pontilhados, (...), representam as simetrias usuais do IBM-1. Deve-se observar que a segunda redução apresenta em um dos passos intermediários uma álgebra

³A notação fica um pouco complicada devendo o leitor notar que os índices L, S, T, J referem-se às partes orbital, de spin, de isospin e ao momento angular total, respectivamente.

de $SU_{ST}(4)$ análoga àquela discutida na seção anterior e que pode levar a uma classificação válida para núcleos leves. Um aspecto fundamental do IBM-4 é que este modelo não requer a validade, exata ou mesmo aproximada, do acoplamento fermiônico de spin-órbita ($\vec{L} \cdot \vec{S}$).

Se a hamiltoniana efetiva do modelo de camadas favorece as correlações de dois núcleons em canais (J, T) que estão contidos no IBM-4, pode-se usar esta aproximação bosônica mesmo que o acoplamento spin-órbita quebre esta simetria. Neste caso, os números quânticos L e S , associados com um bóson-único, são tratados como rótulos efetivos no modelo de camadas e que adquirem um significado exato no espaço bosônico [52]. Os operadores do momento angular orbital, de spin e de isospin desta versão do modelo são escritos respectivamente, como

$$\begin{aligned}\hat{L}_\mu &= \sqrt{10}[b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1} + b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L=\mu, M_S=0, M_T=0}^{L=1, S=0, T=0} \\ \hat{S}_\mu &= \sqrt{2}[b_{0,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,1,0} + \sqrt{5}b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L=0, M_S=\mu, M_T=0}^{L=0, S=1, T=0} \\ \hat{T}_\mu &= \sqrt{2}[b_{0,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,0,1} + \sqrt{5}b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1}]_{M_L=0, M_S=0, M_T=\mu}^{L=0, S=0, T=1}\end{aligned}\quad (3.31)$$

enquanto o operador de quadrupolo é dado por

$$\begin{aligned}\hat{Q}_\mu^{t,x} &= [b_{0,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1} + b_{0,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0} + b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,0,1} + b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,1,0}]_{M_L=\mu, M_S=M_T=0}^{L=2, S=T=0} + \\ &\quad \chi[b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1} + b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L=\mu, M_S=M_T=0}^{L=2, S=T=0}\end{aligned}\quad (3.32)$$

e, finalmente, o operador de Gamow-Teller

$$\begin{aligned}(\hat{Y}_\pm)_{\mu\nu} &= [b_{0,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,1,0} + \sqrt{5}b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L=0, M_S=\mu, M_T=\nu}^{L=0, S=T=1} \pm \\ &\quad [b_{0,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,0,1} + \sqrt{5}b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1}]_{M_L=0, M_S=\mu, M_T=\nu}^{L=0, S=T=1}\end{aligned}\quad (3.33)$$

Grupo	Geradores
$U_L(6)$	$\sqrt{3}[b_{l_1,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l_2,0,1} + b_{l_1,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l_2,1,0}]_{M_L, M_S=0, M_T=0}^{L,S=0,T=0}$
$U_L(5)$	$\left\{ \sqrt{3}[b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1} + b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L, M_S=0, M_T=0}^{L,S=0,T=0} \right\}_{L=0,\dots,4; M_L}$
$SU_L(3)$	$\left\{ \hat{Q}_\mu^{l,\chi=\pm\frac{\sqrt{7}}{2}} \right\}, \{L_\mu\}$
$SO_L(6)$	$\left\{ \hat{Q}_\mu^{l,\chi=0} \right\}, \{ \hat{L}_\mu \}, \{ [d^\dagger \otimes \tilde{d}]_{M_L}^L \}_{L=1,3}$
$SO_L(5)$	$\left\{ \sqrt{3}[b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1} + b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L, M_S=0, M_T=0}^{L,S=0,T=0} \right\}_{L=1,3; M_L}$
$U_{ST}(6)$	$[b_{0,s_1,t_1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,s_2,t_2} + \sqrt{5}b_{2,s_1,t_1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,s_2,t_2}]_{M_L=0, M_S, M_T}^{L=0, S, T}$
$SU_S(3)$	$\hat{Q}^s = [b_{0,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,1,0} + \sqrt{5}b_{2,1,0}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,1,0}]_{M_L=0, M_S=\mu, M_T=0}^{L=0, S=2, T=0}, \{ \hat{S}_\mu \}$
$SU_T(3)$	$\hat{Q}^t = [b_{0,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0,0,1} + \sqrt{5}b_{2,0,1}^\dagger \otimes \tilde{b}_{2,0,1}]_{M_L=0, M_S=0, M_T=\mu}^{L=0, S=0, T=2}, \{ \hat{T}_\mu \}$
$SU_{ST}(4)$	$\{ \hat{T}_\mu \}, \{ \hat{S}_\mu \}, \{ (\hat{Y}_\pm)_{\mu\nu} \}$
$SO_L(3)$	$\{ \hat{L}_\mu \}$
$SO_S(3)$	$\{ \hat{S}_\mu \}$

Tabela 3.3: Geradores dos subgrupos de $U(36)$

Mostra-se na tabela (3.3) geradores dos sub-grupos de $U(36)$, referentes às cadeias que preservam spin-órbita.

3.5 Resumo

Neste capítulo foram apresentados os principais aspectos das versões do IBM que são invariantes por isospin. Discutiu-se também a simetria $SU(4)$, sabidamente importante no estudo de sistemas com o mesmo número de prótons e de nêutrons. Desta maneira, o terreno foi preparado para a apresentação de um modelo algébrico para o cálculo das energias de ligação dos estados fundamental e excitado de núcleos médios e pesados no próximo capítulo.

Capítulo 4

Um modelo algébrico para núcleos com $N = Z$

4.1 Introdução

O conhecimento do valor das massas nucleares, conforme discutido na introdução deste trabalho, é fundamental para a compreensão de fenômenos envolvendo, por exemplo, núcleos pesados ricos em prótons cuja produção ocorre sob condições extremas tais como temperaturas muito altas ($T \geq 8 \times 10^8$) e em regiões onde a densidade de matéria é alta como em pulsares de raios-X, sistemas binários envolvendo discos de acreção em estrelas de nêutrons, etc. As queimas do Hidrogênio e do Hélio são regidas pelos processos rp e αp na superfície de estrelas de nêutrons e alimentam a queima e a síntese de elementos mais pesados junto à linha de gotejamento de prótons. Em particular, os processos rp dependem de modo crucial do cálculo de energias de ligação e de barreiras de fissão. A investigação da nucleossíntese e da geração de energia proveniente da queima de raios-X dependem das massas nucleares, das reações de captura de prótons além de sua taxa de desintegração, assim como do decaimento- β e taxas de processos de captura de elétrons. Deste modo, modelos capazes de calcular massas nucleares e que disponham de um razoável poder de extrapolação para regiões da tabela de nuclídeos onde

ainda não há medidas experimentais, são desejáveis.

Neste capítulo será apresentado um modelo algébrico para o cálculo das energias de ligação dos estados mais baixos do espectro de núcleos com $N = Z$. Existem alguns modelos cujos resultados são muito bons ao longo de toda a tabela periódica. Entretanto, sistemas com o mesmo número de prótons e nêutrons são tratados de maneira quase empírica por estas abordagens no que se refere ao emparelhamento nuclear, em especial as correlações próton-nêutron, ou simplesmente são ignorados. Através da abordagem invariante por isospin que será discutida aqui, tais correlações serão tratadas de maneira mais consistente do que usualmente tem sido feito.

Na primeira seção serão brevemente apresentados dois modelos de massa utilizados correntemente, cujos resultados são muito bons e similares ao longo de toda a tabela de nuclídeos. A ênfase da discussão residirá nos problemas manifestados por esses modelos no cálculo de massas de sistemas com $N = Z$. O primeiro deles é baseado no velho modelo de gota líquida [56], porém com sofisticções adicionais para correções de efeitos de camadas. O segundo utiliza forças nucleares efetivas [55] e têm, deste modo, um caráter mais microscópico do que a primeira abordagem.

O restante do capítulo será dedicado à apresentação do nosso modelo e sua aplicação para uma região de massa onde os dados experimentais estão bem estabelecidos, camada *sd*. Finalmente, estender-se-á sua aplicabilidade à camada *pf* onde existem poucos dados experimentais e, mais importante, onde existe a competição entre os modos isovetorial e isoscalar no emparelhamento nuclear na composição dos estados fundamentais de núcleos ímpar-ímpares.

4.2 Dois modelos para o cálculo de massas nucleares

4.2.1 O modelo de gota líquida melhorado

O modelo da gota desenvolvido por Möller e colaboradores [56] tem suas origens em um trabalho precedente do mesmo grupo [57] que utilizava o potencial convoluído de partícula

independente de Yukawa *Folded-Yukawa single particle potential* [58] na parte microscópica, enquanto que para a parte macroscópica, o modelo utilizado era o *Finite-Range Liquid-Drop Model (FRLDM)* que contém um termo de superfície modificado para tratar adequadamente o curto alcance da força nuclear. Entretanto, esta parte macroscópica do modelo não calculava corretamente a compressibilidade nuclear e variações correspondentes nos raios das distribuições de prótons e nêutrons.

Tais problemas foram resolvidos com a incorporação do modelo de gotícula *droplet-model* [59], uma extensão do modelo da gota-líquida [60], que inclui termos de ordem superior na dependência em $A^{-1/3}$ e $(N - Z)/A$. No entanto, o modelo ainda não era adequado à descrição de núcleos situados próximos às linhas de gotejamento de prótons e nêutrons, falhando catastroficamente no cálculo de barreiras de fissão de núcleos de massas intermediárias. Estas deficiências foram resolvidas por Myers que sugeriu que os termos de superfície do modelo de gotícula fossem generalizados de tal modo a incluir, como no caso do FRLDM, os efeitos decorrentes do curto alcance da força nuclear. Outras melhorias foram sugeridas ao longo do tempo e uma discussão detalhada pode ser encontrada em [56]. Atualmente, é utilizado o *Finite-Range Droplet Model*, cuja fórmula para a parte macroscópica é apresentada a seguir:

$$\begin{aligned}
E_{mac}(N, Z, forma) = & M_H Z + M_N N + (-a_1 + J\bar{\delta}^2 - \frac{1}{2}K\bar{\epsilon}^2)A + \\
& (a_2 B_1 + \frac{9J^2}{4Q}\bar{\delta}^2 \frac{B_s^2}{B_1})A^{2/3} + a_3 A^{1/3} B_k + \\
& a_0 A^0 + c_1 \frac{Z^2}{A^{1/3}} B_3 - c_2 Z^2 A^{1/3} B_\Gamma + \\
& -c_4 \frac{Z^{4/3}}{A^{1/3}} - c_5 Z^2 \frac{B_w B_s}{B_1} + f_0 \frac{Z^2}{A} + \\
& -c_a(N - Z) + \\
& W \left(|I| + \begin{cases} 1/A, N \text{ e } Z \text{ ímpares e iguais} \\ 0, \text{ de outro modo} \end{cases} \right)
\end{aligned}$$

$$+ \begin{cases} \tilde{\Delta}_p + \tilde{\Delta}_n - \delta_{np}, & N \text{ e } Z \text{ ímpares} \\ \tilde{\Delta}_p & Z \text{ ímpar e } N \text{ par} \\ \tilde{\Delta}_n & N \text{ ímpar e } Z \text{ par} \\ 0, & N \text{ e } Z \text{ pares} \end{cases} - a_{el} Z^{2,39}. \quad (4.1)$$

Todos os termos e constantes são consistentemente definidos em [56]. Note que $|I| = (N - Z)/A$ mede o excesso de nêutrons no termo de Wigner e $W = 30$ MeV é uma constante, também chamada de constante de Wigner. Neste modelo, o número de constantes ajustadas às massas nucleares é de 16. Deve-se observar que o termo de Wigner considerado aqui melhora a descrição de sistemas onde $N = Z$. Contudo, falta uma interpretação física consistente para sua escolha. Deste modo, qualquer extrapolação baseada em ajustes para sistemas ainda não conhecidos pode ser perigosa.

4.2.2 A aproximação de Thomas-Fermi

A aproximação de Thomas-Fermi para o cálculo de massas nucleares é baseada inteiramente na utilização de forças nucleares efetivas. O emparelhamento é incluído via teoria de BCS com a utilização de uma interação delta. A utilização deste método permite a descrição do comportamento médio das propriedades nucleares e permite também a conexão entre o método de Hartree-Fock e modelos fenomenológicos como por exemplo o modelo da gota. A força de Skyrme utilizada têm a seguinte forma [55]:

$$\begin{aligned}
V_{ij} = & t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_{ij}) + t_1(1 + x_1 P_\sigma) [p_{ij}^2 \delta(\vec{r}_{ij}) + \dots] / 2\hbar^2 \\
& + t_2(1 + x_2 P_\sigma) \vec{p}_{ij} \cdot \delta(\vec{r}_{ij}) \vec{p}_{ij} / \hbar^2 \\
& + 1/6 t_3(1 + x_3 P_\sigma) [\rho_{q_i}(\vec{r}_i) + \rho_{q_j}(\vec{r}_j)]^\gamma \delta(\vec{r}_{ij}) \\
& + (i/\hbar^2) W_0(\vec{\sigma}_i + \vec{\sigma}_j) \cdot \vec{p}_{ij} \times \delta(\vec{r}_{ij}) \vec{p}_{ij},
\end{aligned} \tag{4.2}$$

onde o índice q denota prótons ou nêutrons.

Este tipo de força tem 10 parâmetros livres e um ajuste aproximado às massas e raios nucleares fornecem ainda quatro vínculos, que correspondem aproximadamente aos quatro primeiros termos do velho modelo de gota líquida, nomeadamente, volume, superfície, simetria e Coulomb [55]. Finalmente, a interação de emparelhamento é descrita via uma força delta como mostra a equação abaixo:

$$V_{par}(\vec{r}_{ij}) = V_0 \delta(\vec{r}_{ij}) \tag{4.3}$$

Deve-se ressaltar que os autores consideram somente o emparelhamento entre partículas idênticas utilizando a mesma intensidade da interação para prótons e nêutrons, ou seja,

$$V_{par,p} = V_{par,n} = -200 \text{ MeV}.$$

Quando se aplica esta abordagem a sistemas com o mesmo número de prótons e de nêutrons, as energias de ligação são sub-estimadas sistematicamente em aproximadamente 2 MeV. Isto ocorre pois não se consegue incluir um termo de Wigner. A este fato, alia-se a dificuldade de aproximações tipo Hartree-Fock em descrever adequadamente o emparelhamento próton-nêutron, qualquer que seja a interação efetiva utilizada. Ao invés disso, argumentam os autores, deve-se tratar tais correlações diretamente nas funções de onda (ansatz como no método de BCS). Este ponto também é questionável na medida em que tais métodos não tratam a simetria de isospin de maneira natural, como no IBM. Sob o argumento de que os núcleos com $N = Z$ são em número reduzido, os autores aceitam a idéia de que sua abordagem não é adequada para o tratamento destes núcleos. De fato, deve-se dizer que os 9 parâmetros da interação (4.2) são ajustados para 1492 núcleos com $A \geq 36$, com um *rms* de 0,730 MeV, o que é prova irrefutável

de seu sucesso quando se quer fazer extrapolações para as linhas de gotejamento de prótons e nêutrons.

É importante dizer que ambos os modelos mencionados nesta seção obtêm sucesso no cálculo de massas nucleares, bem como de outras propriedades dos núcleos e questioná-los não é o objetivo deste trabalho. Entretanto, através dos argumentos apresentados aqui, fica claro que falta algo para a descrição adequada de sistemas com o mesmo número de prótons e nêutrons. É necessário, pelo menos no estágio atual do desenvolvimento destes estudos, um modelo mais simples onde os parâmetros físicos sejam melhor controlados. Em particular, no caso do emparelhamento próton-nêutron, a competição entre os pares com isospin $T = 0$ e $T = 1$ é importante e uma fórmula de massa com poucos parâmetros pode permitir uma compreensão da física relevante.

Com o intuito de tentar entender melhor a estrutura de sistemas com $N = Z$, será proposto na próxima seção um modelo algébrico que considera termos globais - responsáveis pelas propriedades de uma dada região de massa - adicionados de termos que levem em conta ambos os tipos de pares, quebrando dinamicamente a simetria de $SU_{ST}(4)$ e ainda, incluindo o termo de Wigner, que decorre naturalmente de sua estrutura algébrica. Conforme será visto, os resultados para núcleos com $N = Z$ ao longo de duas camadas mostram-se bastante promissores.

4.3 Uma fórmula de massa para os estados com $T = 0$ e $T = 1$ para núcleos com $N = Z$

Uma das linhas de pesquisa mais atraentes em física nuclear concentra-se atualmente no estudo da estrutura nuclear de núcleos pesados com aproximadamente o mesmo número de prótons e de nêutrons. Pode-se encontrá-los nas camadas $pf g$, onde $20 \leq N \approx Z \leq 50$; nesta região manifestam-se a maioria dos aspectos do movimento coletivo. A utilização de um modelo coletivo invariante por isospin, que trate adequadamente sistemas médios e pesados com $N = Z$ é importante nesta região, na medida em que cálculos com o modelo de camadas ainda

são computacionalmente proibitivos. Estes sistemas tornam-se não ligados devido ao excesso de prótons e o desenvolvimento de experimentos para tentar investigar sua estrutura constitui em um enorme desafio para os físicos experimentais [53]. Conforme foi visto nos segundo e terceiro capítulos, o IBM é um modelo capaz de descrever bastante bem os aspectos coletivos nucleares em termos de bósons s e d e nas versões três e quatro do modelo a simetria de isospin é incluída de um modo natural. No IBM-3 o tripleto completo do isospin $T = 1$ é considerado e contém os pares nn , pp e np , com projeções $T_z = +1, -1$ e 0 , respectivamente. Já no IBM-4, aos bósons com $T = 1$ é atribuído um spin intrínseco $S = 0$ e também adicionam-se bósons com $T = 0$ e $S = 1$.

Van Isacker [54] mostra, através da escolha de uma base apropriada do IBM-4, que se pode fazer uma correspondência direta entre alguns subestados do IBM-4 com aqueles do IBM-3, o que torna o formalismo ideal para descrever a competição entre estados com $T = 0$ e $T = 1$. Conforme mostrado no capítulo três, a álgebra dinâmica do IBM-3 é $U(18)$, que é gerada pelo produto dos seis graus de liberdade orbitais ($s + d$) e pelos três graus de liberdade de isospin. A cadeia que conserva este número quântico, além do momento angular é dada por [27]:

$$U(18) \supset [U_L(6) \supset \dots \supset SO_L(3)] \otimes [U_T(3) \supset SU_T(3) \supset SU_T(2)]. \quad (4.4)$$

Por sua vez, a álgebra dinâmica do IBM-4 é $U(36)$ gerada pelo produto dos mesmos graus de liberdade orbitais, desta vez com seis graus de liberdade de spin-isospin $[(ST) = (01), (10)]$. A classificação usual dos estados nucleares, neste caso, é dada através da seguinte redução [28]:

$$U(36) \supset [U_L(6) \supset \dots \supset SO_L(3)] \otimes [U_{ST}(6) \supset SU_{ST}(4) \supset SU_T(2) \otimes SU_S(2)]. \quad (4.5)$$

Pode-se mostrar que se L e S dos bósons corresponderem ao momento angular orbital e spin - o que geralmente não é verdade - a álgebra de supermultipletos de Wigner, composta por $\sum_i \vec{\tau}_i$, $\sum_i \vec{\sigma}_i$ e $\sum_i \vec{\tau}_i \vec{\sigma}_i$, mapeia exatamente em $SU_{ST}(4)$ da cadeia (4.5) [48].

Para estabelecer a correspondência entre os estados do IBM-3 contidos no espectro do IBM-4, as cadeias anteriores (4.4) e (4.5) não são adequadas. A decomposição mais conveniente é a seguinte:

$$U_{ST}(6) \supset U_T(3) \otimes U_S(3) \supset SO_T(3) \otimes SO_S(3). \quad (4.6)$$

O ponto essencial desta discussão é que estados escalares em $U_S(3)$, ($\lambda_S = 0$), e seus valores de isospin, assim como no tratamento da referência [54], que utiliza $SU_S(3)$, coincidem com os mesmos valores encontrados no IBM-3 e, em geral, estados do IBM-4 que possuam um análogo no IBM-3 têm de fato $\lambda_S = 0$ ou ainda $(\lambda_S \mu_S) = (00)$. Utilizando deste modo uma interação que atua nos estados não escalares de $U_S(3)$ da parte baixa do espectro nuclear, reduz-se o IBM-4 ao IBM-3, o que implica sob um ponto de vista físico na quebra de degenerescência entre os pares coletivos com $T = 0$ e $T = 1$. Esta quebra pode ser mostrada considerando-se a seguinte interação:

$$\hat{H}_P = \gamma \hat{C}_2[SU_{ST}(4)] + \xi \hat{C}_1[U_S(3)], \quad (4.7)$$

cujos autovalores podem ser obtidos na base simétrica $[[N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S]$, sendo o número total de bósons dado por $\lambda_T + \lambda_S = N$, onde λ_S e λ_T são, respectivamente, os números de bósons isoescalares e isovetorial. O operador de Casimir de primeira ordem em $U_S(3)$ é diagonal na cadeia (4.6) e tem autovalor igual a λ_S . Por sua vez, o invariante de Casimir de segunda ordem, $C_2[SU_{ST}(4)]$ não é diagonal na base simétrica (da cadeia (4.6)) sendo o cálculo de seus autovalores indicado no Apêndice A-3. Esses elementos de matriz são:

$$V_{\lambda_T \lambda_S \lambda'_T \lambda'_S}^{NTS} \equiv \langle [N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S | \hat{C}_2[SU_{ST}(4)] | [N](\lambda'_T)T \otimes (\lambda'_S)S \rangle, \quad (4.8)$$

com

$$\begin{aligned} V_{\lambda_T \lambda_S \lambda_T \lambda_S}^{NTS} &= 2\lambda_T \lambda_S + 3N + T(T+1) + S(S+1), \\ V_{\lambda_T \lambda_S \lambda_T - 2\lambda_S + 2}^{NTS} &= [(\lambda_T - T)(\lambda_T + T + 1)(\lambda_S - S + 2)(\lambda_S + S + 3)]^{1/2}, \\ V_{\lambda_T \lambda_S \lambda_T + 2\lambda_S - 2}^{NTS} &= [(\lambda_T - T + 2)(\lambda_T + T + 3)(\lambda_S - S)(\lambda_S + S + 1)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Pode-se mostrar que a interação (4.7) é constituída por bósons que carregam somente momento angular $L = 0$ [51] e, fisicamente, quebra a degenerescência entre os pares isoescalares

e isovetoriais. Este fato pode ser entendido através do seguinte exemplo simples para $N = 1$ e $N = 2$ bósons.

No primeiro caso (um bóson), os estados possíveis da base simétrica são dois. Um com $T = 1$ e outro com $T = 0$, dados respectivamente por $||1](1)1 \otimes (0)0\rangle$ e $||1](0)0 \otimes (1)1\rangle$. Utilizando as expressões (4.9), para calcular os elementos de matriz de $\hat{C}_2[SU_{ST}(4)]$ chega-se aos seguintes autovalores (rotulados em termos do número de bósons e do isospin) E_{NT} em função dos parâmetros γ e ξ .

$$\begin{aligned} E_{10} &= 5\gamma \\ E_{11} &= 5\gamma + \xi, \end{aligned} \tag{4.10}$$

que podem ser reescritos definindo $x = \xi/\gamma$ como

$$\begin{aligned} E_{10}/\gamma &= 5 \\ E_{11}/\gamma &= 5 + x. \end{aligned} \tag{4.11}$$

No caso de dois bósons, $N = 2$, os estados da base simétrica são 5, mas considera-se somente aqueles com $T = 0$ e $T = 1$. A matriz da interação (4.7) é bloco-diagonal nos isospins permitindo o cálculo analítico dos autovalores para os estados com $T = 0$ e $T = 1$. Deste modo, fazendo novamente $x = (\xi/\gamma)$ encontra-se:

$$\begin{aligned} E_{20}^{\pm}/\gamma &= 6 + x \pm \sqrt{36 + x^2}, \\ E_{20} &= 12 + 2x, \\ E_{21} &= 12 + x. \end{aligned} \tag{4.12}$$

Na Figura (4.1) mostra-se a quebra de degenerescência para ambos os casos.

Figura 4.1: Quebra de degenerescência entre os pares com $T = 0$ e $T = 1$ no caso de $N = 1$ e $N = 2$ respectivamente. Observe que para $x = 0$ em ambos os casos, estes estados estão degenerados e, quando a interação $\hat{C}_1[U_S(3)]$ é ligada, ocorre a quebra da degenerescência.

4.4 A hamiltoniana algébrica

Na seção anterior, a interação (4.7) mostrou-se adequada quando se pretende estudar a competição entre pares isovetorias e isoescalares. Para a obtenção das massas nucleares de sistemas com $N = Z$, é necessário adicionar a esta interação termos que sejam responsáveis, pelo menos em primeira aproximação, pelo comportamento global da região de massa em consideração. Existem núcleos ímpar-ímpares na camada pf onde a competição entre estes pares no estado fundamental desempenha um papel importante; assim, o modelo que está sendo proposto [61] visa à descrição de tais sistemas através do tratamento simultâneo de termos globais e dos que descrevem a competição entre os componentes isovetorias e isoescalares. Para escrever a hamiltoniana referente à cadeia algébrica (4.6) lança-se mão, no início, dos operadores de Casimir de $U_L(6)$ de primeira e segunda ordens, respectivamente. Tais operadores estão relacionados com o número total de bósons N do sistema e rotulam as representações irredutíveis mais simétricas deste grupo. Fisicamente, tais termos levam em consideração as propriedades nucleares globais de uma dada região de massa (tais termos variam suavemente com A). Os próximos termos são justamente os da interação (4.7). A escolha do invariante de Casimir de $U_S(3)$ tem sua justificativa na sua relação com a intensidade do potencial spin-órbita que atua em favor dos estados isovetoriais, conforme mencionado no Apêndice A-4. Finalmente, o último termo a ser adicionado deve incluir os efeitos das energias de Wigner e de simetria, respectivamente. Algebricamente esta interação é dada por $\hat{C}_2[SO_T(3)]$. Deste modo,

$$\hat{H} = E_0 + \alpha \hat{C}_1[U_L(6)] + \beta \hat{C}_2[U_L(6)] + \gamma \hat{C}_2[SU_{TS}(4)] + \xi \hat{C}_1[U_S(3)] + \eta \hat{C}_2[SO_T(3)], \quad (4.13)$$

onde E_0 é a energia de ligação de um núcleo duplamente mágico (caroço) de uma dada região de massa e sua introdução se dá porque este formalismo não se aplica a sistemas sem bósons, isto é, calcula-se sempre as energias de ligação em referência a um dado caroço duplamente mágico. Todos os operadores de Casimir da hamiltoniana (4.13), com exceção daquele de $SU_{ST}(4)$ que tem seus autovalores dados pelas expressões (4.8) e (4.9), são diagonais na base simétrica da cadeia (4.6) sendo seus autovalores dados por:

$$\begin{aligned}
C_1[U_L(6)][N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S &= N[N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S, \\
C_2[U_L(6)][N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S &= N(N+5)[N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S, \\
C_1[U_S(3)][N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S &= \lambda_S.
\end{aligned} \tag{4.14}$$

Cabe aqui dizer que os demais operadores da cadeia (4.6) têm o mesmo efeito dos que foram escolhidos e deste modo não foram considerados. O espectro gerado pela hamiltoniana (4.13) torna-se mais rico à medida que o número de bósons aumenta, não se restringido os estados gerados àqueles com isospin $T = 0$ e $T = 1$. Deve-se então truncar o espaço de configuração a estes últimos. Ainda assim, precisa-se da garantia de que os autovalores relevantes sejam aqueles que contribuem para a maximização da energia de ligação destes estados, ou ainda garantir que as diferenças entre o valores experimentais e os teóricos seja mínima, ou seja,

$$\sigma = \sum_j (E_j^{exp} - E_j^t)^2 \rightarrow \text{mínima}, \tag{4.15}$$

com

$$E_j^t = \langle \phi_j^{ef} | H | \phi_j^{ef} \rangle, \tag{4.16}$$

com ϕ^{ef} sendo a função de onda do estado fundamental.

Deste modo, escrevendo-se $H = \sum_i \chi_i C_i$,

$$E_j^t = \sum_i \chi_i \langle \phi_j^{ef} | C_i | \phi_j^{ef} \rangle. \tag{4.17}$$

Denotando $\langle \phi_j^{ef} | C_i | \phi_j^{ef} \rangle$ como C_i^j calcula-se agora:

$$\frac{\partial}{\partial \chi_k} \sum_j (E_j^{exp} - \sum_i \chi_i C_i^j)^2 = 0, \tag{4.18}$$

obtendo-se desta maneira o seguinte sistema de equações:

$$\sum_i \chi_i (\sum_j C_i^j C_k^j) = \sum_j E_j^{exp} C_k^j. \tag{4.19}$$

Finalmente, a partir de uma estimativa inicial dos parâmetros, χ_0 , o sistema (4.19) é resolvido retornando os valores χ_j que ajustam uma dada região de massa. Deve-se lembrar

que os cálculos computacionais são feitos para os estados com $T = 0$ e $T = 1$, o que restringe consideravelmente o espaço de configuração. A diagonalização numérica da hamiltoniana (4.13), mesmo sem esta restrição no espaço de configuração, não apresentou problemas para até $N = 20$ bósons.

O IBM não contém a interação coulombiana que precisa ser subtraída dos dados experimentais. Para isto, foram utilizados os termos da fórmula de massa do FRDM, (4.1), referentes à energia de Coulomb, termo de correção de troca coulombiano e termo de correção para o fator de forma do próton, respectivamente, conforme mostra a equação

$$E^{Coulomb} = c_1 \frac{Z^2}{A^{1/3}} B_3 - c_4 \frac{Z^{4/3}}{A^{1/3}} + f_0 \frac{Z^2}{A}, \quad (4.20)$$

com as constantes dadas por:

$$\begin{aligned} c_1 &= \frac{3e^2}{5r_0} \text{ com } r_0 = 1,16\text{fm} \\ c_4 &= \frac{5}{4} \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} c_1 \\ f_0 &= -\frac{1}{8} \left(\frac{145}{8} \right) \frac{r_p^2 e^2}{r_0^3} \text{ com } r_p = 0.80\text{fm}, \end{aligned} \quad (4.21)$$

B_3 é extraído da referência [56] no caso de núcleos esféricos, o que pode ser questionado pois em uma parte das regiões onde o modelo será aplicado, os núcleos são deformados; assim os valores da correção coulombiana podem ser considerados como uma aproximação de primeira ordem para alguns núcleos das regiões estudadas.

Nas próximas seções, os resultados para as camadas sd e pf serão apresentados e discutidos.

4.5 A camada sd

Com o intuito de testar o modelo proposto, escolheu-se os núcleos com $N = Z$ da camada sd , pois nesta região os valores experimentais das massas dos estados fundamentais [62] e excitados [64] são bem conhecidos.

Para evitar efeitos de meio de camada (mid-shell effects) que poderiam afetar os sinais dos parâmetros envolvidos, o ajuste é feito para as duas metades desta camada, ou seja, considera-se inicialmente o ^{16}O , núcleo duplamente mágico, como sendo o caroço nuclear (camada $sd - I$ na tabela (4.1)) e ajustam-se os cinco parâmetros até $N = 6$ bósons (^{28}Si). Neste caso os bósons pn são do tipo “partícula”. Já para a segunda metade desta camada ($sd - II$) o ^{40}Ca é o caroço nuclear e o ajuste foi feito até $N = 5$ bósons (^{30}P), considerados como “buracos”. Mostra-se na tabela (4.1) o conjunto de parâmetros ajustados para ambas as metades desta camada.

	α	β	γ	ξ	η
$sd - I$	16,0604	0,4765	0,1897	-6,1461	-1,5047
$sd - II$	-24,5375	0,1100	0,0649	-3,7347	-0,9230

Tabela 4.1: Parâmetros ajustados para ambas as metades da camada sd , nomeadamente $sd - I$ e $sd - II$

Núcleo	T	$E^{Exp}(\text{MeV})$	$E^{Teo}(\text{MeV})$	$\delta E(\text{MeV})$
^{16}O	0	138,8514	caroço	
^{18}F	0	151,6618	152,5734	-0,9116
^{18}F	1	150,6198	152,7008	-2,0810
^{20}Ne	0	178,3069	178,8865	-0,5796
^{20}Ne	1	168,0329	167,7553	0,2776
^{22}Na	0	195,4755	195,3323	0,1432
^{22}Na	1	194,8185	194,7219	0,0966
^{24}Mg	0	223,5452	222,9177	0,6275
^{24}Mg	1	214,0292	212,5431	1,4861
^{26}Al	0	241,4227	242,1810	-0,7583
^{26}Al	1	241,1947	240,7737	0,4209
^{28}Si	0	270,5807	271,0289	-0,4481
^{28}Si	1	261,2647	261,4649	-0,2002

Tabela 4.2: Energias de ligação para núcleos com $N = Z$ da primeira metade da camada sd ajustadas com os parâmetros $sd - I$ da (4.1). O rms foi de 0,8759 MeV. δE são as diferenças entre os valores experimental e teórico.

Nas tabelas (4.2) e (4.3) são apresentadas as energias de ligação dos estados fundamentais de todos os núcleos com $N = Z$ que têm isospin $T = 0$, sendo a única exceção o ^{34}Cl que tem $T = 1$. Também são mostradas as energias do primeiro estado excitado com $T = 1$ ($T = 0$ para o ^{34}Cl). Os resultados experimentais nesta camada são muito bem estabelecidos e furtamo-nos de colocar suas incertezas (pequenas), o que será feito quando a camada pf for considerada.

Núcleo	T	$E^{Exp}(\text{MeV})$	$E^{Teo}(\text{MeV})$	$\delta E(\text{MeV})$
^{30}P	0	289,4325	289,4562	-0,0237
^{30}P	1	288,7555	288,9684	-0,2129
^{32}S	0	315,6549	315,3003	0,3546
^{32}S	1	308,6529	308,5067	0,1462
^{34}Cl	1	334,7437	334,7231	0,0206
^{34}Cl	0	334,5977	334,9380	-0,3403
^{36}Ar	0	361,4502	361,5132	-0,0630
^{36}Ar	1	354,8392	354,4558	0,3833
^{38}K	0	381,1859	381,3506	-0,1647
^{38}K	1	381,0559	381,3932	-0,3373
^{40}Ca	0	408,6383	caroço	

Tabela 4.3: Energias de ligação para os núcleos com $N = Z$ da segunda metade da camada sd ajustadas com os parâmetros $sd - II$ da tabela (4.1). O rms calculado foi de 0,2452 MeV. δE são as diferenças entre os valores experimental e teórico.

A partir das Tabelas (4.2) e (4.3) é possível calcular as diferenças de energia entre os estados com $T = 1$ e $T = 0$ para esta região de massa e compará-los com a sistemática experimental e com a fórmula empírica de Macchiavelli e colaboradores [65]. Os resultados são mostrados na Figura (4.2).

Os resultados são bastante bons considerando, em particular, o pequeno número de parâmetros utilizado no modelo. Deve-se lembrar que, neste caso não foram feitas extrapolações. Salienta-se ainda que o espaço de configuração foi restrito a dois estados de isospin, embora o método utilizado forneça todo o espectro. Com isso ganhou-se confiança para se aplicar o modelo para a camada pf , onde existem poucos - e recentes - dados experimentais. Nesta nova região o modelo será usado para fazer previsões acerca de massas e estados excitados de núcleos com $N = Z$ na direção da linha de gotejamento de prótons.

Figura 4.2: Diferenças $E(T=1) - E(T=0)$ na camada sd .

4.6 A camada pf

Na camada pf os estados fundamentais dos núcleos ímpar-ímpares, com exceção do ^{58}Cu , têm isospin $T=1$ e existe a competição entre os modos isovetorial e isoescalar do emparelhamento pn para tais sistemas. Deste modo, o modelo aqui proposto é ideal para o tratamento destes efeitos. Núcleos mais pesados com $N=Z$ foram recentemente produzidos nesta região de massa, mas os dados ainda são escassos, de tal maneira que previsões teóricas para quantidades mensuráveis, como massas nucleares e meias vidas, por exemplo, são bem vindas.

Na tabela a seguir são apresentadas as massas, devidamente corrigidas por Coulomb, utilizadas para o ajuste dos cinco parâmetros da hamiltoniana (4.13), as diferenças de energia entre os estados com $T=1$ e $T=0$, assim como as referências aos trabalhos que contém os dados experimentais utilizados.

Núcleo	T^{ef}	$BE^{Exp}(\text{MeV})$	$\Delta E_{10} (\text{MeV})$	Ref.
^{56}Ni	0	$607,2890 \pm 0,0110$	caroço	[62]
^{58}Cu	0	$628,4941 \pm 0,0025$	-0,2030	[62] e [64]
^{60}Zn	0	$654,6747 \pm 0,0011$	4,5060	[62]
^{62}Ga	1	$676,355 \pm 0,028$	0,571	[62] e [63]
^{64}Ge	0	$702,85 \pm 0,25$	4,75	[62]
^{66}As	1	$724,21 \pm 0,68$	0,84	[66] e [67]
^{68}Se	0	$750,8 \pm 1,0$	4,4	[66] e [62]
^{70}Br	1	$773,47 \pm 0,36$	1,34	[62] e [69]
^{72}Kr	0	$800,88 \pm 0,27$	5,07	[62]
^{74}Rb	1	$823,58 \pm 0,72$	-	[62]
^{76}Sr	0	$851,92 \pm 0,10$	4,89	[68] e [62]

Tabela 4.4: Energias de ligação experimentais, com correção coulombiana, para os núcleos com $N = Z$ da primeira metade da camada pf utilizados no ajuste dos parâmetros da hamiltoniana nuclear. Mostra-se também o isospin do estado fundamental assim como as diferenças de energias entre os estados com $T = 1$ e $T = 0$, ΔE_{10} e as referências de onde foram extraídos os dados (massas e estados excitados respectivamente). Deve-se notar que para o ^{70}Br o estado excitado tem momento angular $J^\pi = 3^+$.

Os parâmetros obtidos que ajustam estes pontos são dados na Tabela (4.5), indicados por $pf - I$, a seguir:

	α	β	γ	ξ	η
$pf - I$	22,8153	0,1175	-0,0679	-1,9526	-0,4504
$pf - II$	-28,4637	0,1183	-0,1877	-1,0450	-0,5124

Tabela 4.5: Parâmetros ajustados para ambas metades da camada pf , nomeadamente $pf - I$ e $pf - II$.

Parte-se agora para extrapolações usando o presente modelo; calculou-se o primeiro estado excitado com $(J^\pi, T) = (1^+, 0)$ do núcleo ^{74}Rb . Até o momento este estado não foi medido e o que se tem é o valor experimental de $E_{T=0} = 1,006$ MeV medido por Rudolph *et al.* [70] para este estado, o qual tem momento angular $J = 3$ sendo a paridade desconhecida. Podem-se também prever as energias de ligação do estado fundamental ($T = 1$) e do primeiro estado excitado ($T = 0$) do ^{78}Y que também não foram medidas. Para se evitar novamente efeitos de meio de camada outro ajuste foi feito para a segunda metade desta região como também mostrado na Tabela (4.5) com o rótulo de $pf - II$. Os resultados para a primeira metade da camada pf são mostrados na Tabela (4.6).

Núcleo	T	$E^{Exp}(\text{MeV})$	$E^{Teo}(\text{MeV})$	$\delta E(\text{MeV})$
^{58}Cu	0	$628,4941 \pm 0,0025$	628,5172	-0,0231
^{58}Cu	1	$628,2911 \pm 0,0030$	628,6682	-0,3771
^{60}Zn	0	$654,6747 \pm 0,0011$	654,1993	0,4754
^{60}Zn	1	$650,1687 \pm 0,0025$	649,9956	0,1731
^{62}Ga	1	$676,355 \pm 0,028$	676,072	0,283
^{62}Ga	0	$675,784 \pm 0,028$	675,658	0,126
^{64}Ge	0	$702,85 \pm 0,2500$	702,09	0,76
^{64}Ge	1	$698,1070 \pm 0,0040$	697,6469	0,4601
^{66}As	1	$724,21 \pm 0,68$	724,45	-0,24
^{66}As	0	$723,38 \pm 0,68$	723,81	-0,43
^{68}Se	0	$750,8 \pm 1,0$	750,9	-0,1
^{68}Se	1	$746,4 \pm 1,0$	746,3	0,1
^{70}Br	1	$773,47^* \pm 0,36$	773,79	-0,32
^{70}Br	0	$772,14 \pm 0,36$	772,94	-0,80
^{72}Kr	0	$800,88 \pm 0,27$	800,76	0,12
^{72}Kr	1	$795,80 \pm 0,27$	795,91	-0,11
^{74}Rb	1	$823,58 \pm 0,72$	824,08	-0,50
^{74}Rb	0	$822,58 \pm 0,72$	823,05	-0,47
^{76}Sr	0	$851,92 \pm 0,10$	851,54	0,38
^{76}Sr	1	$847,02 \pm 0,10$	846,51	0,51
^{78}Y	1	-	875,34	-
^{78}Y	0	-	874,12	-

Tabela 4.6: Energias de ligação para núcleos com $N = Z$ da primeira metade da camada pf calculadas com os parâmetros $pf - I$ da tabela (4.5). O rms , foi de 0,3962 MeV. O símbolo * indica que a massa do núcleo ^{70}Br é uma extrapolação [62]. Novamente δE são as diferenças entre os valores experimental e teórico.

Tomando as energias experimentais dos núcleos ímpar-ímpares como ponto de referência, a figura (4.3) apresenta a posição relativa dos estados com $T = 1$ e com $T = 0$, incluindo as previsão para o núcleo ^{78}Y . Note que para os núcleos ^{70}Br e ^{74}Rb os níveis experimentais não estão conectados com aqueles teóricos pois o momento angular total entre eles é diferente. Os últimos têm $(J^\pi, T) = (1^+, 0)$.

Figura 4.3: Parte baixa dos espectros de núcleos ímpar-ímpares com $N = Z$ (em sequência, para cada grupo de estados: ^{58}Cu , ^{62}Ga , ^{66}As , ^{70}Br , ^{74}Rb e ^{78}Y) para a primeira metade da camada pf . Estão indicados por 3^+ e 3 os primeiros estados excitados dos núcleos ^{70}Br e ^{74}Rb com $(J, T) = (3^+, 0)$ e $(J, T) = (3, 0)$ medidos experimentalmente.

Para a segunda metade da camada pf a situação é delicada pois não existem, até o momento, dados experimentais para sistemas com $N = Z$ e o ajuste feito baseia-se exclusivamente em extrapolações a partir dos dados de Audi-Wapstra [62], adicionando-se o cálculo anteriormente efetuado para o ^{78}Y . Foram deste modo utilizados todos os núcleos par-pares (dois estados ajustados considerando os análogos isobáricos) e as energias de ligação dos sistemas ímpar-ímpares, além dos dois estados do ^{78}Y . Acreditamos ser importante a inclusão de pelo menos um núcleo ímpar-ímpar para que os parâmetros responsáveis pela quebra de degenerescência entre os pares isoescares e isovetorias, γ e ξ , tenham o comportamento similar ao da primeira metade

Núcleo	T	$BE^{Exp}(\text{MeV})$	$\Delta E_{10} (\text{MeV})$
^{80}Zr	0	$903,65^* \pm 0,30$	$5,27^*$
^{82}Nb	1	$927,1^* \pm 0,3$	-
^{84}Mo	0	$955,98^* \pm 0,40$	$5,44^*$
^{86}Tc	1	$979,62^* \pm 0,30$	-
^{88}Ru	0	$1008,33^* \pm 0,50$	$4,89^*$
^{90}Rh	1	$1032,65^* \pm 0,50$	-
^{92}Pd	0	$1061,72^* \pm 0,50$	$4,53^*$
^{94}Ag	1	$1086,5^* \pm 0,5$	-
^{96}Cd	0	$1116,46^* \pm 0,50$	$4,36^*$
^{98}In	1	$1141,49^* \pm 0,50$	-
^{100}Sn	0	$1172,97 \pm 1,1$	caroço

Tabela 4.7: Energias de ligação experimentais para os núcleos com $N = Z$ da segunda metade da camada pf , corrigidas por Coulomb, utilizadas no ajuste dos parâmetros da hamiltoniana nuclear. Mostra-se também o isospin do estado fundamental T , assim como as diferenças de energias ΔE_{10} . As asterísticos (*) indicam que os valores utilizados são extrapolações extraídas da referência [62].

desta camada. Os sistemas utilizados para se fazer o ajuste dos parâmetros são mostrados na Tabela (4.7). Finalmente, o caroço nuclear desta metade da camada é o ^{100}Sn cuja massa foi recentemente medida [71]. Assim como na camada sd , os bósons são aqui constituídos por buracos. Outra hipótese acerca desta região é feita ao assumirmos que os núcleos ímpar-ímpares têm isospin do estado fundamental $T = 1$. Muito embora existam indícios de que este seja o caso, deve-se aguardar por resultados experimentais para se obter a confirmação.

Os parâmetros obtidos são mostrados na Tabela (4.5), rotulados $pf-II$ e, com eles, foram feitas previsões para as massas (mostradas na Tabela (4.6)) assim como para a separação, $\Delta E_{10} = E(T = 1) - E(T = 0)$, entre os estados com $T = 0$ e $T = 1$ dos núcleos de toda a

camada pf , mostradas na figura (4.4).

Figura 4.4: Diferenças de energia entre os estados com $T = 1$ e $T = 0$ para toda a camada pf comparados com os dados experimentais (quando disponíveis e com a fórmula empírica da referência [65].

Em seguida, comparam-se os resultados deste trabalho com os cálculos feitos com o IBM-4 contendo todas as interações [72] e com os dados experimentais. Os resultados do nosso modelo não são tão bons quanto o IBM-4 completo mas, considerando o pequeno número de parâmetros e a simplicidade da interação utilizada, vê-se que a diferença não é muito grande, ficando na casa de mais ou menos 200 keV para os estados mais baixos. Estes resultados são bastantes promissores e se aliados àqueles mostrados na figura (4.4) pode-se dizer que, com este modelo simples, podem-se fazer previsões bastantes boas para as massas dos núcleos e também para as diferenças de energia entre os estados fundamental ($T = 1$) e excitado com ($T = 0$) de núcleos ímpar-ímpares com $N = Z$. Obviamente como foram utilizadas extrapolações no ajuste dos parâmetros da hamiltonina deve-se esperar por medidas experimentais para se melhorar as previsões desta abordagem.

Núcleo	T	$E^{Expt}(\text{MeV})$	$E^{Teo}(\text{MeV})$	$\delta E(\text{MeV})$
^{80}Zr	0	$903,65 \pm 0,30$	903,67	-0,02
^{80}Zr	1	$898,38 \pm 0,40$	898,00	-0,38
^{82}Nb	1	$927,11 \pm 0,30$	926,96	-0,15
^{82}Nb	0	-	926,55	-
^{84}Mo	0	$955,98 \pm 0,40$	955,53	0,45
^{84}Mo	1	$950,54 \pm 0,30$	950,09	0,45
^{86}Tc	1	$979,62 \pm 0,30$	979,29	0,33
^{86}Tc	0	-	979,17	-
^{88}Ru	0	$1008,33 \pm 0,50$	1008,37	-0,04
^{88}Ru	1	$1003,44 \pm 0,30$	1003,17	0,27
^{90}Rh	1	$1032,65 \pm 0,50$	1032,61	0,04
^{90}Rh	0	-	1032,81	-
^{92}Pd	0	$1061,72 \pm 0,50$	1062,21	-0,49
^{92}Pd	1	$1057,25 \pm 0,40$	1057,33	-0,08
^{94}Ag	1	$1086,50 \pm 0,50$	1086,92	-0,42
^{94}Ag	0	-	1087,49	-
^{96}Cd	0	$1116,46 \pm 0,50$	1117,06	-0,60
^{96}Cd	1	$1112,10 \pm 0,50$	1112,35	-0,25
^{98}In	1	$1141,493 \pm 0,503$	1142,228	-0,735
^{98}In	0	-	1143,23	-
^{100}Sn	0	$1172,97 \pm 1,10$	caroço	-

Tabela 4.8: Energias de ligação para núcleos com $N = Z$ da segunda metade da camada pf . O rms , foi de 0,41 MeV. Mais uma vez δE é a diferença entre os valores experimental e teórico.

INSTITUTO DE FÍSICA

Serviço de Biblioteca e Informação

Tombo: 3617
ex. 1

Figura 4.5: Comparação das diferenças ΔE_{10} entre os cálculos com o IBM-4 completo e aqueles efetuados neste trabalho (IBM-4 ($L = 0$)). Mostram-se também os dados experimentais.

4.7 Resumo

Mostrou-se neste capítulo que uma abordagem *à la* IBM-4 com a interação de emparelhamento no canal $L = 0$ é adequada para se tratar a competição entre os pares pn isoescares e isovetoriais. Através da utilização de uma hamiltoniana algébrica com poucos parâmetros conseguiu-se calcular as energias de ligação dos estados fundamentais de núcleos com $N = Z$ junto às camadas sd e pf , assim como alguns estados excitados. Previsões foram feitas para sistemas que ainda não foram medidos, notadamente o núcleo ímpar-ímpar ^{78}Y na primeira metade da camada pf . Como não há ainda dados experimentais para a segunda metade desta camada deve-se olhar os resultados para esta região com cautela. Idealmente, cálculos com o IBM-4 completo deveriam ser efetuados pois são mais ricos, contudo, ainda estão limitados numericamente até o ^{70}Br . Deste modo, esta abordagem é importante pois consegue ir além, pelo menos nos estados mais baixos do espectro para núcleos pesados com $N = Z$.

Comentários finais e perspectivas

A massa de um núcleo e, portanto sua energia de ligação, tem um papel fundamental em física nuclear pois informações a respeito da estrutura do núcleo atômico e da interação entre seus constituintes podem ser obtidas a partir desta quantidade.

Existem muitos modelos que foram desenvolvidos para se reproduzir ou calcular massas nucleares e atualmente, o esforço concentra-se nos núcleos situados fora do vale de estabilidade. Em especial, aqueles sistemas pesados ricos em prótons têm um papel importante em astrofísica.

Núcleos com $N = Z$ ainda constituem-se em um problema para os modelos correntes devido ao efeito do termo de Wigner, associado a simetria de spin-isopin, e que ainda não tem uma justificativa microscópica. Neste trabalho este termo surge de maneira natural, da estrutura algébrica do modelo proposto (através da inclusão do operador de Casimir de segunda ordem, $\hat{C}_2[SO(3)]$ na hamiltoniana nuclear).

Também conseguimos, através da utilização de uma interação que separa os estados com isospin $T = 0$ daqueles com $T = 1$ aliada a termos que são responsáveis pelas propriedades globais de uma dada região de massa, fazer previsões para sistemas pesados ricos em prótons que ainda não foram medidos. Este fato deve-se basicamente ao truncamento do espaço de configuração considerado. Em princípio, podem-se estender os cálculos para outros estados excitados mas não acreditamos que os resultados sejam tão bons quanto os apresentados aqui pois, neste caso e também para núcleos com $N \neq Z$, os bósons com $L = 2$ são importantes para a descrição adequado do espectro nuclear. Uma vantagem deste modelo está na clara interpretação dos parâmetros da hamiltoniana pois eles estão associados com operadores que

descrevem sem ambiguidade a física do problema, ou seja: os parâmetros α e β descrevem o comportamento global de um dado núcleo. Se tentarmos interpretá-los baseando-nos no modelo de gota líquida, o parâmetro α está relacionado com o termo de volume, γ está ligado ao fato de se considerar os pares isovetorias e isoescalares com a mesma importância nos sistemas com $N = Z$, o termo ξ representa a intensidade da quebra dinâmica da simetria de $SU(4)$ e, finalmente, o termo η está relacionado respectivamente aos termos de Wigner e energia de simetria do núcleo.

É importante salientar que este modelo não têm a pretensão de substituir os abordagens correntes, que dão conta de outras propriedades nucleares além das energias de ligação e são muito mais complexas tendo um alcance maior, mas sim tentar indicar uma direção a ser seguida no estudo de núcleos com $N = Z$, ou seja, vem mostrar a importância de um tratamento adequado onde a física relevante apareça de maneira simples.

Um dos problemas interessantes que podem ser seguidos com este trabalho é incluir as representações menos simétricas $[N-1, 1]$ que são notadamente importantes para a descrição dos estados energeticamente mais baixos de sistemas ímpar-ímpares com $N \neq Z$. Temos dúvidas se o cálculo dos elementos de matriz da interação simulada pelo operador de Casimir $\hat{C}_2[SU_{ST}(4)]$, não mais na base simétrica, mas agora em uma base do tipo $[[N-1, 1](\lambda_T, \mu_T)T \otimes (\lambda_S, \mu_S)S]$, tem solução analítica. Outra possibilidade ainda seria tentar estender este modelo de tal modo que núcleos de massa ímpar entre em seu escopo. Com isso o conceito de supersimetria (no sentido de se tratar bósons e férmions no mesmo formalismo como se faz no IBFM) seria utilizado. Em tempo, pode-se tentar utilizar outras técnicas de bosonização, diferentes das propostas por Juillet [72], para estudar a microscopia dos pares pn envolvidos nos cálculos. Este problema certamente não é simples mas sem dúvida alguma muito relevante para o desenvolvimento de cálculos envolvendo o IBM-4.

Apêndice A

A.1 Produto Externo através das Tabelas de Young

Conforme foi visto no primeiro capítulo as Tabelas de Young são utilizadas para descrever as representações irredutíveis (irreps) dos grupos unitários $U(n)$ e $S(n)$ com a vantagem de tornar claras as propriedades de simetria dos estados. Quando se está interessado nas aplicações dos métodos grupo-teóricos, freqüentemente é necessário recorrer ao produto externo de duas representações irredutíveis. Para isto lança-se mão destes diagramas conforme discute-se via o seguinte exemplo simples:

Suponha que se quer calcular o produto externo de duas irreps de $U(n)$. Para isto, deve-se desenhar o padrão correspondente à primeira irrep. No segundo padrão deve-se rotular cada “caixa” da primeira linha com a letra α , cada caixa da segunda linha com a letra β e assim por diante se houverem mais linhas. A idéia é aplicar a segunda tabela de Young de modo a aumentar a primeira e para isto, seguem-se algumas regras:

- Os rótulos idênticos não devem aparecer na mesma coluna no diagrama resultante.
- Contando os α 's, β 's, etc, da direita para a esquerda começando da quina superior direita; durante a contagem, o número de α 's não deve ser menor do que o número de β 's e assim por diante.
- O gráfico resultante deve ser regular, ou seja, $[f_1 \geq f_2 \geq \dots \geq f_n]$.

Seguindo, portanto, estas regras o produto das duas irreps $[21]$ e $[2]$ é representado na figura (A.1):

Figura A.1: Produto externo das irreps $[21] \otimes [20]$ de $U(n)$

Na representação usual o mesmo produto externo pode ser escrito como:

$$[21] \otimes [2] = [41] \oplus [32] \oplus [311] \oplus [221] \quad (\text{A.1})$$

A.2 Grupos de Lie

Nesta seção são apresentadas algumas definições úteis sobre alguns grupos de Lie que serão freqüentemente mencionados ao longo desta tese.

- Grupos unitários

As matrizes unitárias complexas A de grau n formam uma representação do grupo unitário $U(n)$ com n^2 parâmetros complexos que deixa a forma hermiteana, $\sum_{i=1}^n z_i z_i^*$, invariante. Desde que a unitariedade das matrizes A requer que $AA^\dagger = 1$, isto é, $\sum_t a_{it} a_{tj}^* = \delta_{ij}$, temos portanto $|a_{ij}|^2 \leq 1$.

- Grupos unitários especiais

Se restringirmos as matrizes unitárias àquelas que tiverem determinante $+1$, obtém-se os grupos unitários especiais, $SU(n)$, com $n^2 - 1$ parâmetros.

- Grupos ortogonais

O grupo das matrizes ortogonais complexas de grau n formam um grupo de $n(n - 1)$

parâmetros denotado $O(n, C)$. Uma vez que $A^t A = I$, tem-se que $|A| = \pm 1$ e portanto, o grupo se quebra em duas partes desconexas não sendo possível ir continuamente de uma para outra. As matrizes ortogonais de determinante +1 formam um subgrupo de $O(n, C)$ denominado grupo ortogonal complexo especial, $SO(n, C)$, que tem $n(n-1)$ parâmetros e deixa a forma quadrática complexa, $\sum_{i=1}^n z_i^2$, invariante.

- Grupos ortogonais especiais

O conjunto de matrizes ortogonais reais de grau n forma o grupo real ortogonal $O(n, R)$, que denotaremos ao longo deste trabalho simplesmente como $O(n)$, de $\frac{1}{2}n(n-1)$ parâmetros. Enquanto as matrizes com determinante +1 formam o grupo ortogonal especial $SO(n, R)$, cuja notação será $SO(n)$.

Nas tabelas (A.1) e (A.2) mostram-se os números de geradores e o número de partições que caracterizam uma dada representação tensorial para os principais Grupos de Lie respectivamente.

Grupo	Número de Geradores
$U(n)$	n^2
$SU(n)$	$n^2 - 1$
$O(n)$	$\frac{1}{2}n(n-1)$
$SO(n)$	$\frac{1}{2}n(n-1) - 1$

Tabela A.1: Número de geradores para os principais grupos de Lie.

Na tabela (A.3) listam-se os autovalores em termos das partições f_i dos Invariantes de Casimir dos grupos de Lie. Os principais passos para a obtenção destes resultados podem ser encontrados em [17].

Grupo	Número
$U(n)$	n
$SU(n)$	$n - 1$
$O(n)$	$\frac{n}{2}$ para n par
$O(n)$	$\frac{(n-1)}{2}$ para n ímpar

Tabela A.2: Número de inteiros que rotulam as representações tensoriais dos grupos de Lie.

Grupo	Partições	Operador	$\langle C_i \rangle$
$U(n)$	$[f_1, f_2, \dots, f_n]$	C_1	$f = \sum_{i=1}^n f_i$
		C_2	$\sum_{i=1}^n f_i(f_i + n + 1 - 2i)$
$SU(n)$	$[f_1, f_2, \dots, f_{n-1}, f_n = 0]$	C_2	$\sum_{i=1}^n (f_i - \frac{f}{n})(f_i - \frac{f}{n} + 2n - 2i)$
$SU(3)$	$(\lambda, \mu) = (f_1 - f_2, f_2)$	C_2	$\frac{2}{3}(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu))$
$SU(4)$	$(\lambda, \mu, \nu) = (f_1 - f_2, f_2 - f_3, f_3)$	C_2	$3\lambda(\lambda + 4) + 3\nu(\nu + 4) +$ $4\mu(\mu + 4) + 4\mu(\lambda + \nu) + 2\lambda\nu$
$O(2n + 1)$	$(f_1, f_2 \dots f_n)$	C_2	$\sum_{i=1}^n 2f_i(f_i + 2n + 1 - 2i)$
$O(2n)$	$(f_1, f_2 \dots f_n)$	C_2	$\sum_{i=1}^n 2f_i(f_i + 2n - 2i)$

Tabela A.3: Autovalores dos principais operadores de Casimir de grupos de Lie.

A.3 Cálculo dos elementos de matriz do $C_2[SU_{ST}(4)]$ na base simétrica

Nesta seção mostram-se os principais passos para o cálculo dos elementos de matriz do operador de Casimir de $SU_{ST}(4)$ na base simétrica $[[N](\lambda_T)T \otimes (\lambda_S)S]$ da cadeia (4.6). A redução $U(36) \supset U_L(6) \otimes U_{ST}(6)$ é a que nos interessa aqui.

Os geradores de $U(36)$ têm a seguinte forma: $b_{lm_l, sm_s, lm_l}^\dagger b_{l'm'_l, s'm'_s, l'm'_l}$.

Os geradores de $U_{ST}(6)$ são 36 e podem ser escritos como

$$\sum_{lm_l} b_{lm_l, sm_s, tm_t}^\dagger b_{l' m'_l, s' m'_s, t' m'_t}, \quad (\text{A.2})$$

ou, abreviando a notação e efetuando a soma em m_l pode-se escrever

$$\sum_l (2l+1) (b_{lst}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l's't'})_{0M_S M_T}^{0ST} \quad (\text{A.3})$$

Os bósons do IBM-4 têm $(ST) = (01), (10)$ e, considerando todas as combinações possíveis, pode-se escrever os operadores relevantes para o cálculo. Fazendo $l = 0$ segue da equação (A.3) que:

$$(b_{0st}^\dagger \otimes \tilde{b}_{0s't'})_{0M_S M_T}^{0ST}. \quad (\text{A.4})$$

Já os geradores de $SU_{ST}(4)$ são, conforme visto no Capítulo 3, $\hat{T}_\mu$, $\hat{S}_\mu$ e $\hat{Y}_{\mu\nu}$ cujas combinações de spin-isospin são respectivamente: $(ST) = (01), (10), (11)$. Estes operadores podem ser escritos explicitamente como

$$\begin{aligned} \hat{S}_\mu &= \sqrt{2} \sum_l \sqrt{2l+1} (b_{l10}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l10})_{0M_S 0}^{010} \\ \hat{T}_\mu &= \sqrt{2} \sum_l \sqrt{2l+1} (b_{l01}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l01})_{00M_T}^{001} \\ \hat{Y}_\pm &= \sqrt{2} \sum_l \sqrt{2l+1} (b_{l10}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l01} \pm b_{l01}^\dagger \otimes \tilde{b}_{l10})_{0M_S M_T}^{011}, \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

portanto, para $l = 0$ pode-se escrever $\hat{C}_2[SU_{ST}(4)]$ como:

$$\hat{C}_2[SU_{ST}(4)] = 3(Y_+ \otimes Y_+)^{00} + T^2 + S^2 \quad (\text{A.6})$$

Fazendo a seguinte associação com o objetivo de simplificar a notação:

$$\begin{aligned} b_{l01}^\dagger &\rightarrow a_t^\dagger ; \tilde{b}_{l01} \rightarrow \tilde{a}_t \\ b_{l10}^\dagger &\rightarrow a_s^\dagger ; \tilde{b}_{l10} \rightarrow \tilde{a}_s \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

e utilizando sucessivamente a identidade [30] com $\hat{j}_i = \sqrt{2j_i + 1}$

$$|j_1 j_2(J_{12}) j_3 j_4(J_{34}) : J\rangle = \sum_{J_{13} J_{24}} \hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{j}_3 \hat{j}_4 \left\{ \begin{array}{c} j_1 j_2 J_{12} \\ j_3 j_4 J_{34} \\ J_{13} J_{24} J \end{array} \right\} |j_1 j_3(J_{13}) j_2 j_4(J_{24}) : J\rangle, \quad (\text{A.8})$$

chega-se à seguinte expressão:

$$[Y_+ \otimes Y_+]^{00} = \frac{1}{3}[\hat{n}_s^+ \hat{n}_t^- + \hat{n}_t^+ \hat{n}_s^- + 2\hat{n}_s \hat{n}_t + 3\hat{n}_s + 3\hat{n}_t] + \hat{T}^2 + \hat{S}^2, \quad (\text{A.9})$$

onde,

$$\begin{aligned} \hat{n}_t^+ &= \sqrt{3}(a_t^\dagger \otimes a_t^\dagger)_0^0 \\ \hat{n}_s^+ &= \sqrt{3}(a_s^\dagger \otimes a_s^\dagger)_0^0 \\ \hat{n}_t^- &= \sqrt{3}(\tilde{a}_t \otimes \tilde{a}_t)_0^0 \\ \hat{n}_s^- &= \sqrt{3}(\tilde{a}_s \otimes \tilde{a}_s)_0^0. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

O cálculo dos elementos de matriz $\langle [N](n_t)T \otimes (n_s)S | \hat{C}_2[SU_{ST}(4)] | [N](n'_t)T \otimes (n'_s)S \rangle$ é levado adiante mediante as seguintes considerações:

Como $(a_s^\dagger \otimes a_s^\dagger)_0^0$ cria dois bósons, sendo o número total de bósons dado por $N = n_t + n_s$, deve-se ter $n'_s = n_s + 2$. Analogamente, como $(\tilde{a}_t \otimes \tilde{a}_t)_0^0$ aniquila dois bósons deve-se ter $n'_t = n_t - 2$.

Calculando então cada termo da expressão (A.9) e utilizando-nos sucessivamente o teorema de Wigner-Eckart:

$$\langle \alpha J M | T_q^k | \alpha' J' M' \rangle = (-)^{J-M} \left(\begin{array}{c} J k J' \\ -M q M' \end{array} \right) \langle \alpha J || \mathbf{T}^k || \alpha' J' \rangle \quad (\text{A.11})$$

obtém-se as expressões (4.9) como resultado.

A.4 A influência do potencial de spin-órbita nas correlações superfluidas de sistemas com $N = Z$

O potencial spin-órbita é importante nas correlações de emparelhamento presentes em núcleos com $N = Z$ pois favorece os pares isovetoriais conforme será argumentado. Parte-se então de uma hamiltoniana fermiônica que leva em consideração um termo de campo médio adicionado de uma interação de emparelhamento nos canais isoescalar e isovetorial.

$$H = \sum_{\rho} \varepsilon_{\rho} \sqrt{2(2j+1)} [a_{\rho}^{\dagger} \otimes \tilde{a}_{\rho}]_{0,0}^{0,0} + V_p, \quad (\text{A.12})$$

O rótulo $\rho = (n, l, j)$ representa um orbital em uma camada cujo potencial é um oscilador harmônico e, além disso,

$$\varepsilon_{\rho} = \varepsilon_{n,l}^0 - \frac{V_{so}}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \quad (\text{A.13})$$

é a energia deste orbital na presença de um potencial spin-órbita $-V_{so} \vec{l} \cdot \vec{s}$ ($V_{so} > 0$).

A interação residual utilizada é aquela do modelo $SO(8)$ [74],

$$V_p = -\frac{g\Omega(1+x)}{2} A_{0,1}^{\dagger} \tilde{A}_{0,1} - \frac{g\Omega(1-x)}{2} A_{1,0}^{\dagger} \tilde{A}_{1,0}. \quad (\text{A.14})$$

com $\Omega = \sum_l (2l+1)$ e os operadores

$$A_{S,M_S,T,M_T}^{\dagger} = (1\sqrt{2\Omega}) \sum_l \sqrt{2l+1} [a_{l,1/2,1/2}^{\dagger} \otimes a_{l,1/2,1/2}^{\dagger}]_{M_L=0,M_S,M_T}^{L=0,S,T}, \quad (\text{A.15})$$

são pares fermiônicos coletivos.

O parâmetro x controla a importância relativa entre dos dois tipos de emparelhamento $T = 0$ e $T = 1$; vê-se que, para $x = 0$, os dois modos competem em igualdade de condições, enquanto que para $x = 1$ quem domina é o canal isovetorial; para $x = -1$ o modo isoescalar prevalece. A diagonalização da hamiltoniana (A.12) na camada pf é um processo que requer muito esforço numérico; Juillet e Josse [73] utilizaram técnicas de bosonização [75] para contornar este problema, conseguindo mapear a interação residual (A.14) (fermiônica) em uma interação bosônica em termos de $U(6)$ formada por bósons com $J = 0, T = 1$ ($s^{\dagger}$) e bósons

com $J = 1, T = 0$ ($p^\dagger$) relacionados, respectivamente, com as partes isovetorial e isoescalar do emparelhamento. A imagem bosônica da hamiltoniana (A.12) é

$$H_B = \varepsilon_{01}\hat{N}_{01} + \varepsilon_{10}\hat{N}_{10} + (V_P)_B. \quad (\text{A.16})$$

A conclusão da referência [73] para núcleos ímpar-ímpar com $N = Z$ é a seguinte:

- Se o canal isoescalar domina ou se há igualdade nos dois canais ($x \leq 0$), os níveis com $(J = 0, T = 1)$ são favorecidos pelo acoplamento spin-órbita à medida que a massa aumenta. Por outro lado, se o canal isovetorial domina, ($x > 0$), o acoplamento spin-órbita tem um efeito desprezível na posição relativa destes pares.

Para núcleos par-par com $N = Z$ os resultados são similares para os estados com $J = T = 0$.

Tratando a interação spin-órbita perturbativamente dentro do limite $SO(8)$, podem ser obtidas expressões analíticas que conectam os bósons $s^\dagger$ e $p^\dagger$, através do termo de um corpo, da hamiltoniana (A.16), com a intensidade do potencial $\vec{l} \cdot \vec{s}$, ou seja,

$$\begin{aligned} \varepsilon_{01} &= -\frac{g\Omega(1+x)}{2} - \frac{8\alpha V_{so}^2}{g\Omega(1+x)}, \\ \varepsilon_{10} &= -\frac{g\Omega(1-x)}{2} - \frac{8\beta V_{so}^2}{3g\Omega(1-x)}, \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

onde $\alpha = \sum_l l(l+1)$ e $\beta = \sum_l \frac{l(l+1)(4l^2+4l-1)^2}{(2l+1)^3}$.

Em nossa hamiltoniana algébrica, foi utilizado o operador de Casimir $\hat{C}_1[U_S(3)]$ que, conforme visto no Capítulo 4, é responsável pela quebra de degenerescência entre os pares isosescalar e isovetorial. Seu autovalor está relacionado com o número de bósons isoescalar $\hat{N}_{01}$ e portanto tem conexão com a intensidade do potencial spin-órbita de acordo com a primeira das equação (A.17). De maneira esquemática pode-se estabelecer a relação,

$$\lambda_S \rightarrow \varepsilon_{01}, \quad (\text{A.18})$$

e o que de fato acontece, com exceção do ^{58}Cu é que os estados com $T = 1$ são favorecidos pelo nosso modelo.

Bibliografia

- [1] Wallace, R. K. e Woosley, S. E., *Astrophys. J. Suppl. Series* **45**, 389 (1981).
- [2] Boyd, R. N e Tanihata, I., *Physics Today*, 44 (06/1992).
- [3] Schatz, H., Bildsten, L., Cumming, A. e Wiescher, M., *Astrophys. J.* **524**, 1014 (1999).
- [4] Bildsten, L., *Astrophys. J.* **501**, L89 (1998).
- [5] Ruthledge, R., *et al.*, *Astrophys. J.* **529**, 985 (2000).
- [6] Schatz, H. *et al.*, *Phys. Rep.* **294**, 167 (1998).
- [7] Wigner, E.P., "On the consequences of the symmetry of the nuclear hamiltonian on the spectroscopy of nuclei.", *Phys. Rev.* **51**, 106 (1937).
- [8] Racah, G., " Theory of complex spectra I", *Phys. Rev.* **61**, 186 (1942);
Phys. Rev. **62**, 438 (1942); *Phys. Rev.* **63**, 367 (1943) 367;
Phys. Rev. **76**, 1352 (1949).
- [9] Elliot, J. P., "Collective motion in the nuclear shell model. I-Classification schemes for states of mixed configurations", *Proc. Roy. Soc. A* **245**, 128, 562 (1958).
- [10] Iachello, F. e Van Isacker, P., "The interacting boson-fermion model," -*Cambridge monographs on mathematical physics*, 1991.
- [11] Lipkin, H.J., "Lie groups for pedestrians", *North-Holland*, Amsterdam, 1966.

- [12] Gilmore, R., "Lie groups, Lie algebras and some of their applications," *Wiley-Interscience*, New York, 1974.
- [13] Hamermesh, M., "Group Theory and Its Applications to Physical Problems", *Addison-Wesley*, Reading, MA, 1962;
Wybourne, B.G., "Classical Groups for physicists," *Wiley-Interscience*, New York, 1974.
- [14] Castanões, O., Frank, A. e Lopez-Peña, R., "Noether's theorem and dynamical groups in quantum mechanics", *J. Phys. A* **23**, 5141 (1990).
- [15] Frank, A. e Van Isacker, P., "Algebraic methods in molecular and nuclear structure physics" *Wiley-Interscience*, New York, 1994.
- [16] Rose, M.E., "Elementary Theory of Angular Momentum", *Wiley*, New York (1957).
- [17] Iachello, F., "Group Theory and Nuclear Spectroscopy" *Springer-Verlag*, Ed. Bertsch, G., Gull Lake, 140 (1979).
- [18] Rainwater, J., *Phys. Rev.* **79**, 432 (1950).
- [19] Bohr, A., *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **26**, n^o14 (1952);
Bohr, A. e Mottelson, B. R., *Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk.* **27**, n^o16 (1953).
- [20] Brink, D. M., Toledo Piza, A. F. R. e Kerman, A., *Phys. Lett.* **19**, 413 (1965);
Gneuss, G. e Greiner, W., *Nucl. Phys. A* **171**, 449 (1971).
- [21] Kishimoto, T., e Tamura, T., *Nucl. Phys. A* **270**, 317 (1977) e referências incluídas.
- [22] Arima, A. e Iachello, F., *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1069 (1975).
- [23] Faessler, A., *Nucl. Phys.* **85**, 653 (1966).
- [24] Bohr, A. e Mottelson, B. R., "Nuclear Structure, vol.2" *W. A. Benjamin*, Reading, Massachusetts (1975).

- [25] Arima, A. e Iachello, F., *Ann. Phys.* **99**, 33 (1976);
Ann. Phys. **111**, 201 (1978);
Phys. Rev. Lett. **40**, 385 (1978).
- [26] Otsuka, T., Arima, A., Iachello, F. e Talmi, I., *Phys. Lett.* **78 B**, 139 (1978);
Otsuka, T., Arima, A. e Iachello, F., *Nucl. Phys. A* **309**, 1 (1978);
Otsuka, T., Tese de Doutorado, *Universidade de Tokyo*, Japão 1979.
- [27] Elliot, J.P., e White, A. P., *Phys. Lett.* **97 B**, 169 (1980).
- [28] Elliot, J.P., e Evans, J. A., *Phys. Lett.* **101 B**, 216 (1981).
- [29] Arima, A. e Iachello, F., "The interacting boson models", *Cambridge Press*, New York, (1987).
- [30] de Shalit, A. e Talmi, I., "Nuclear Shell Theory" (*New York, Academic Press*), (1963).
- [31] Casten, R. F., "Empirical Tests of the IBM",
(Capítulo 3: "Group Theory of the IBM and Algebraic Models in General")
Editado por Casten, R. F., *Contemporary Concepts in Physics, vol 6*
- *Harwood Academic Publishers-Pennsilvanya*, (1993).
- [32] Lipas, P. O., "Algebraic Approaches to Nuclear Structure",
(Capítulo 2: "Group Theory of the IBM and Algebraic Models in General")
Editado por Casten, R. F., *Contemporary Concepts in Physics, vol 6*
- *Harwood Academic Publishers-Pennsilvanya*, (1993).
- [33] Vergados, J. D., *Nucl.Phys. A* **111**, 681 (1968).
- [34] Schiffer, J. P. e True, W. W., *Rev. Mod. Phys.* **48**, 191 (1976).
- [35] Otsuka, T., "Algebraic Approaches to Nuclear Structure",
(Capítulo 4: "Microscopic Basis and Introduction to IBM-2")

Editado por Casten, R. F., *Contemporary Concepts in Physics, vol 6*
- Harwood Academic Publishers-Pennsilvanya, (1993).

- [36] Scholten, O., "The interacting boson approximation model and applications" - Phd-Thesis, Groningen -1980.
- [37] Duval, P.D. e Barrett, B.R., *Phys.Rev. C* **23**, 492 (1981).
- [38] Van Isacker, P. *et. al. Phys. Lett.***104 B**, 5 (1981).
- [39] Morrison, I., Faessler, A. e Lima, C. L., *Nucl. Phys A***372**, 13 (1981).
- [40] Heisenberg, W., *Z. Phys* **77**, 1 (1932).
- [41] Hund, F., *Z. Phys.* **105**, 202 (1937).
- [42] Soper, J. M., "Isospin in Nuclear Physics", Wilkinson, D. H, Capítulo 6 *North-Holland* Amsterdam, (1969).
- [43] Talmi, I., "Simple Models of Complex Nuclei: The Shell Model and the Interacting Boson Model", Capítulo 29. *Hardwood Press* New York, (1993).
- [44] Franzini, P. e Radicati, L. A., *Phys.Lett* **6**, 322 (1963).
- [45] Chakraborty, M., Kota, V. K. B. e Parikh, J. C., *Phys. Rev. Lett.* **45**, 1073 (1980).
- [46] Van Isacker, P., Warner, D. D., e Brenner, D. S., *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4607 (1995).
- [47] Brenner, D. S., Wesselborg, C., Casten, R. F., Warner, D. D. e Zhang, J.-Y., *Phys. Lett. B* **243**, 1 (1990).
- [48] Van Isacker, P., *Physica Scripta* **56**, 103-109 (1995).
- [49] Elliot, J. P. e Evans, J. A., *Phys.Lett.B* **195**,1 (1987).
- [50] Kota, V. K. B., *Ann. Phys.* **280**:(1), (2000).

- [51] Van Isacker, P., Dukelsky, J., Pittel, S. e Juillet, O., *J. Phys. G: Nucl. Parti. Phys* **24**, 1261 (1998).
- [52] Juillet, O., “Symétries nucléaires à faible isospin”, Thèse de Doctorat de l’Université de Caen (1999).
- [53] Warner, D. D., “Proceedings of the 9th Symposium on Capture of Gamma-Ray Spectroscopy and Related Topics ”, Budapest, 8-12th Oct. 1996.
- [54] Van Isacker, P. e Warner, D. D., *Phys. Rev. Lett* **78**, 3266 (1997).
- [55] Dutta, A. K., Arcoragi, J.-P, Pearson, J. M, Behrman R. e Tondeur, F., *Nucl. Phys. A* **458**, 77 (1986);
Tondeur, F., Dutta, A. K., Pearson, J. M. e Behrman, R., *Nucl. Phys. A* **470**, 93 (1987);
Pearson, J. M., Aboussir, Y., Dutta, A. K., Nayak, R. C. e Farine, M., *Nucl. Phys. A* **528**, 1 (1991);
Aboussir, Y., Pearson, J. M., Dutta, A. K. e Tondeur, F., *Nucl. Phys. A* **549**, 155 (1992).
- [56] Möller, P., Nix, J. R., Myers, W. D. e Swiatecki, W. J., *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **59**, 185 (1995).
- [57] Möller, P. e Nix, J. R., *Nucl. Phys. A* **361**, 177 (1981).
- [58] Bolsterli, M., Fiset, E. O., Nix, J. R. e Norton, J. L., *Phys. Rev. C* **5**, 1050 (1972);
Möller, P. e Nix, J. R., *Nucl. Phys. A* **229**, 269 (1974).
- [59] Myers, W. D. e Swiatecki, W. J., *Ann. Phys.* **55**, 395 (1969);
Myers, W. D. e Swiatecki, W. J., *Ann. Phys.* **84**, 186 (1974);
Myers, W. D., “Droplet Model of Atomic Nuclei” *IFI/Plenum*, New York (1977).
- [60] Myers, W. D. e Swiatecki, W. J., *Nucl. Phys.* **81**, 1 (1966);
- [61] Baldini-Neto, E., Lima, C. L., e Van Isacker, P., a ser submetido.

- [62] Audi, G. e Wapstra, H., *Nucl. Phys. A* **595**, 409 (1995).
- [63] Vincent, S. M., *Phys. Lett. B* **437**, 264 (1998).
- [64] Singh, B., *Nuclear Data Sheets* **87**, 177 (1999).
- [65] Macchiavelli, A. O., *et al.* "PINGST 2000, Selected topics on $N = Z$ nuclei", 156 (2000).
- [66] Lima, G. F. e Lépine-Szily, A., comunicação privada.
- [67] Grzywacz, R., *et al. Phys. Lett. B* **429**, 247 (1998).
- [68] Lalleman, A. S., "Mésure de Masses des Noyaux dans la region de $N = Z = 40$ ", Thèse de Doctorat, Université de Caen, (1996) não publicada.
- [69] Jenkins, D. e Lister, K., comunicação privada.
- [70] Rudolph, D., *et al. Phys. Rev. Lett.* **76**, 376 (1996).
- [71] Chartier, M., "Mésures directes de masses de ^{100}Sn et de noyaux exotiques proches de la ligne $N = Z$ ", Thèse de Doctorat, Université de Caen, (1996) não publicada.
- [72] Juillet, O., Van Isacker, P. e Warner, D., *Phys. Rev. C* **63**, 054312-1 (2001).
- [73] Juillet, O. e Josse, E., *Eur. Phys. J. A.* **8**, 291-294 (2000).
- [74] Flowers, B. H. e Spikowski, S., *Proc. Phys. Soc.* **84**, 673 (1964).
- [75] Klein, A. e Marshalek, E. R., *Rev. Mod. Phys* **63**, 375 (1991).