Universidade de São Paulo
Instituto de Física

Cálculo de potenciais deformados no contexto do modelo generalizado de rotação-vibração

Daniel Felipe Morales Botero

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

Dissertação de Mestrado apresentada ao
Instituto de Física para a obtenção do
título de Mestre em Ciências.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Luiz Carlos Chamon - IFUSP

Prof. Dr. Nilberto Heder Medina - IFUSP

Prof. Dr. Jesús Lubián Ríos - UFF

São Paulo
2013

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

Morales Botero, Daniel Felipe

Cálculo de potenciais deformados no contexto do modelo
generalizado de rotação-vibração. – São Paulo, 2013.

Dissertação (Mestrado) – Universidade de São Paulo.
Instituto de Física. Depto. Física Nuclear

Orientador: Prof. Dr. Luiz Carlos Chamon

Área de Concentração: Física

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

USP/IF/SBI-100/2013

*A mi mamá, Rosalba; a mis tías, Melva e Beatriz; a mi novia, Diana y a mi hermano,
Gabriel...con todo el Amor del mundo.*

Agradecimentos

Agradeço ao meu orientador, o professor Chamon, pela excelente orientação; pelos conhecimentos e valiosas ideias compartilhadas para fazer este trabalho; pelo tempo dedicado e a paciência para ler, corrigir e ajudar neste escrito; pelo exemplo de trabalho e retidão. Infinitos agradecimentos.

À minha família e namorada, pelo infinito amor que me dão.

Ao Ciro, que me acolheu em São Paulo quando cheguei da Colômbia.

Ao pessoal da CPG do IFUSP e funcionários do Departamento de Física Nuclear, pela atenção e ajuda prestada em todos os momentos em que precisei da sua colaboração.

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

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

À CAPES, pelo apoio financeiro.

E finalmente, ao povo brasileiro, pela oportunidade de estudar Física Nuclear em uma das melhores universidades do mundo ao lado de alguns dos melhores especialistas no tema. Pela bonita experiência de vida.

¡Gracias a todos!

Resumo

Para efeito de aplicação em cálculos de canais acoplados, potenciais calculados de maneira exata para sistemas envolvendo núcleos deformados não são adequados, pois resultariam em integrais multidimensionais muito difíceis de serem calculadas numericamente pelo tempo de cálculo computacional que isso implica. Nesta dissertação, apresentamos expressões para calcular de maneira aproximada os potenciais nuclear e coulombiano entre núcleos deformados, sendo essas expressões uma generalização de resultados obtidos em trabalhos anteriores. Os cálculos foram feitos no contexto do Modelo Generalizado de Rotação-Vibração (GRVM), que é um modelo de estrutura nuclear desenvolvido recentemente.

Para obter essas expressões, as densidades nucleares foram expandidas até segunda ordem na deformação e foi levado em conta um valor finito para a difusividade nuclear nos cálculos de dupla convolução. Comparamos os correspondentes resultados obtidos com aqueles provenientes de algumas outras expressões, usualmente assumidas nesse tipo de cálculos, e também com os valores exatos (obtidos ao resolver numericamente a integral sextupla no cálculo de dupla convolução). As análises mostraram que a nossa aproximação -GRVM- é superior a essas outras de uma maneira geral, e, em particular, de forma muito melhor na região de pequenas distâncias de interação. As expressões analíticas do GRVM exprimem a dependência do potencial com as deformações de maneira explícita, sendo essa característica extremamente útil para a obtenção de potenciais de acoplamento de maneira analítica.

Abstract

For systems involving deformed nuclei, potentials calculated through an exact form are not appropriated for applications in coupled-channel (CC) calculations, because they result in multidimensional integrals impossible to be calculated numerically. In this work, we present equations for calculating the heavy-ion nuclear and Coulomb potentials, in an approximate form, that express the dependence of the potential on the deformations explicitly. This characteristic is extremely useful for obtaining coupling potentials analytically. The calculations were made in the context of the Generalized Rotation-Vibration Model (GRVM), which is a recently developed model of nuclear structure.

To obtain these expressions, the nuclear densities were expanded up to second order in the deformation and a finite diffuseness value was taken into account in the calculation of the double-folding potential. We have compared the corresponding results with those obtained from other expressions usually assumed in such calculations, and also with the exact potential strength values (obtained by solving numerically the six dimensional integral of the double-folding calculation). The analyses show that our approach presents better results than the others, particularly so much better in the region of interaction of small distances.

Lista de Figuras

1.2.1 Modos de deformação nuclear.	6
1.3.1 Esquema de uma colisão nuclear em que um dos núcleos é deformado, mostrando os diferentes sistemas de coordenadas.	9
1.3.2 Plano $\beta-\gamma$ onde são indicadas os diferentes tipos de formas para a deformação de quadrupolo.	11
1.4.1 Exemplo de função de distribuição de Fermi para densidades nucleares. . . .	13
2.1.1 Esquema da colisão de dois núcleos deformados, mostrando as deformações, os raios e diversas distâncias.	20
2.2.1 Definição das coordenadas usadas na construção do potencial de dupla convolução.	23
3.0.1 Densidade de matéria para o ^{28}Si para diferentes orientações espaciais no sistema de referência intrínseco.	34
3.0.2 Densidade de matéria para o ^{154}Sm para diferentes orientações espaciais no sistema de referência intrínseco.	35
3.1.1 Formas dos núcleos deformados para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$, para as três configurações de ângulos de Euler.	36

3.1.2 Correções dos potenciais coulombiano e nuclear e potencial efetivo $V_C + V_N$, calculados de maneira exata para as três configurações angulares do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$	37
3.2.1 Correções dos potenciais coulombiano e nuclear obtidas com diversas aproxi- mações (nossas) para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$ na Configuração 1 dos ângulos de Euler.	38
3.2.2 Soma dos potenciais coulombiano e nuclear deformados mostrando as barreiras de potencial e correção do potencial coulombiano para grandes distâncias de interação obtidos para diversas aproximações (nossas) para o sistema $^{28}\text{Si} +$ ^{154}Sm na Configuração 1 dos ângulos de Euler.	39
3.2.3 O mesmo da Figura 3.2.1, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler. .	40
3.2.4 O mesmo da Figura 3.2.2, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler. .	40
3.2.5 O mesmo da Figura 3.2.1, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler. .	41
3.2.6 O mesmo da Figura 3.2.2, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler. .	41
3.3.1 Correções dos potenciais coulombiano e nuclear obtidas com diversas aproxi- mações para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$ na Configuração 1 dos ângulos de Euler.	43
3.3.2 Correção do potencial coulombiano, obtido para diversas aproximações (GRVM e usuais) e soma dos potenciais coulombiano e nuclear deformados mostrando as barreiras de potencial no caso da Configuração 1 do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$.	44
3.3.3 O mesmo da Figura 3.3.1, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler. .	44
3.3.4 O mesmo da Figura 3.3.2, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler. .	45
3.3.5 O mesmo da Figura 3.3.1, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler. .	45
3.3.6 O mesmo da Figura 3.3.2, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler. .	46
3.3.7 O mesmo da Figura 3.3.1, mas para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$	47

3.3.8 O mesmo da Figura 3.3.2, mas para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$	47
3.3.9 O mesmo da Figura 3.3.1, mas para o sistema $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$	48
3.3.10 O mesmo da Figura 3.3.2, mas para o sistema $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$	48

Lista de Tabelas

3.1	Valores médios de deformação ($\bar{\beta}_\lambda$) e amplitudes de vibração (b_λ) para as deformações de quadrupolo ($\lambda = 2$) e octupolo ($\lambda = 3$) da sistemática feita em [CC10].	33
3.2	Coordenadas do centro de massa (em fm) para as distribuições de matéria dos núcleos nos sistemas $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$, $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$ e $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$ nas configurações de ângulos de Euler indicadas. Apresenta-se, também, os valores da diferença relativa percentual entre os valores de ρ_0 obtidos com as expressões (1.4.8) e (1.4.9).	49

Índice

Introdução	1
1 Deformações Nucleares	3
1.1 Descrição matemática das deformações	4
1.1.1 Algumas propriedades dos coeficientes $\alpha_{\lambda\mu}$	4
1.2 Tipos de deformações	5
1.3 Sistemas de coordenadas: laboratório e intrínseco	7
1.3.1 Um exemplo: caso quadrupolar	8
1.4 GRVM e proposta desenvolvida	11
1.4.1 Densidades do núcleo, difusividade e distribuição de Fermi	12
1.4.2 Aproximações estudadas e parâmetros de deformação	14
2 Cálculos dos potenciais coulombiano e nuclear	19
2.1 Algumas aproximações usadas frequentemente	20
2.1.1 Caso nuclear	20
2.1.2 Caso coulombiano	22
2.2 Potenciais de dupla convolução	22

2.3	Aproximações feitas neste trabalho	26
2.3.1	Difusividade nula	26
2.3.2	Difusividade não nula	29
2.3.3	Forma unificada	30
2.4	Potencial nuclear exato	31
3	Resultados obtidos e análises	33
3.1	Resultados exatos para os potenciais	35
3.2	Resultados obtidos com nossas diferentes aproximações	37
3.3	Comparação dos resultados do modelo GRVM com outras aproximações feitas usualmente	42
3.4	Conservação de volume e posição do centro de massa	49
	Conclusões e perspectivas	51
A	Cálculos numéricos	53
A.1	Aspectos numéricos e computacionais dos cálculos	53
	Referências Bibliográficas	59

Introdução

Reações nucleares entre íons pesados envolvem o estudo da colisão de objetos compostos de muitos corpos, núcleons, que, portanto, têm uma estrutura interna. Vários processos (canais) de reação podem resultar dessa colisão. Um cálculo de canais acoplados (CA) envolve a solução simultânea de várias equações acopladas, que levam em conta explicitamente os diversos canais de reação [Tho88]. Cálculos desse tipo têm sido amplamente utilizados na análise de dados experimentais para diversos sistemas. Em muitos trabalhos, têm sido ressaltados os grandes efeitos dos acoplamentos sobre as seções de choque. Esse formalismo representa a forma mais moderna de tratar a colisão entre núcleos pesados.

Por outro lado, dados experimentais recentes, extremadamente precisos, de fusão nuclear e de espalhamento elástico, não têm sido descritos de maneira totalmente satisfatória por cálculos CA (e.g. [MHD⁺07]). Num trabalho recente [CNC09], mostra-se que essas discrepâncias talvez estejam ligadas às aproximações comumente utilizadas em cálculos CA.

Dentro do formalismo CA, o potencial de acoplamento entre dois estados $|m\rangle$ e $|n\rangle$ é obtido levando em conta as correspondentes funções de onda através de $V_{mn} = \langle m|V|n\rangle$, onde V representa as interações coulombiana e nuclear. Isso resulta em integrais multidimensionais muito difíceis de serem calculadas numericamente sem nenhuma aproximação, devido à limitação de capacidade de processamento dos computadores atuais. Assim sendo, muitas aproximações são feitas, tanto nas funções de onda, quanto nas interações, e modelos simplificados de estrutura nuclear, como os modelos rotacional e vibracional, são muitas vezes assumidos para calcular os correspondentes potenciais de acoplamento no caso de excitações inelásticas.

Por outro lado, desenvolveu-se recentemente um modelo teórico [CC10] para descrever a estrutura nuclear, o qual é mais geral do que os modelos rotacional e vibracional. Esse novo modelo, conhecido como Modelo Generalizado de Rotação-Vibração (GRVM), envolve vibrações de densidades nucleares em torno de deformações permanentes de quadrupolo ($\lambda = 2$) e octupolo ($\lambda = 3$). De fato, os modelos rotacional e vibracional são casos particulares do GRVM. O modelo GRVM propõe que, para descrever as densidades e, portanto, potenciais, mais acuradamente, é necessário expandir a densidade nuclear até termos de segunda ordem na deformação e, também, levar em conta a difusividade da densidade.

Assim sendo, modelagem e aproximações são sempre utilizadas nos cálculos de potenciais de acoplamento. No entanto, é obviamente necessário que tais aproximações não envolvam perda significativa de precisão. O presente trabalho tem como objetivo desenvolver o cálculo de potenciais nuclear e coulombiano no contexto do GRVM. O método que desenvolvemos aqui é, de fato, uma generalização de um método já apresentado em outros trabalhos [TRI00, CNP⁺04, CCG04]. Como será demonstrado, esse método resulta em cálculos bastante acurados de potenciais entre íons pesados. As equações obtidas nesse contexto expressam a dependência do potencial em relação às deformações nucleares de forma explícita, característica essa que é essencial para a aplicação prática desse método na obtenção de potenciais de acoplamento.

Capítulo 1

Deformações Nucleares

Muitos fenômenos no núcleo indicam que o movimento nuclear não consiste só de excitações monopartícula, como poderia ser sugerido pelo *modelo de camadas*. Há vários efeitos típicos que implicam um movimento coletivo dos núcleons. O espectro de excitação de núcleos par-par, numa região de energia até 2 ou 3 MeV, apresenta estruturas de banda características [GMB97], que são interpretadas como vibrações ou rotações da superfície nuclear no modelo proposto por Bohr e Mottelson [BM69]. A ideia física por trás desse modelo implica tratar os núcleos como gotas líquidas incompressíveis, especialmente para números de massa grandes. Os modelos coletivos, ou geométricos, diferentemente do modelo de camadas, têm um enfoque macroscópico, definindo uma forma geométrica específica para o núcleo e estudando as rotações e vibrações de tais formas (geralmente não esféricas). De fato, o movimento rotacional pode existir apenas para núcleos com uma forma não esférica [Lil01].

Duas visões são normalmente assumidas para descrever a estrutura nuclear dentro dos modelos coletivos: no modelo rotacional (*Rotational Model*, RM), o núcleo tem uma deformação fixa β , enquanto no modelo vibracional puro (*Vibrational Model*, VM) as densidades nucleares apresentam flutuações (de amplitude b) ao redor da forma esférica. O caso $\beta \gg b$, onde são permitidas pequenas flutuações ao redor do núcleo deformado, tem sido tratado no modelo de rotação-vibração (*Rotation-Vibration Model*, RVM) [EG70]. Finalmente, no chamado modelo generalizado de rotação-vibração (*Generalized Rotation-Vibration Model*, GRVM) [CC10], a relação entre β e b pode ter um valor qualquer.

Para leituras adicionais, num nível introdutório, sobre modelos nucleares que envolvem núcleos deformados, recomendamos as referências: [EG70, Edm96, GMB97, RS80, Won08, Lil01].

1.1 Descrição matemática das deformações

O movimento da superfície nuclear pode ser descrito por uma expansão em multipolos, onde cada termo é representado pelos harmônicos esféricos $Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)$ e os parâmetros de deformação dependentes do tempo $\alpha_{\lambda\mu}^*(t)$ [EG70, CC10]:

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

$R(\theta, \phi, t)$ denota o raio da superfície nuclear na direção (θ, ϕ) no tempo t . R_0 é o raio do núcleo esférico, que é atingido quando todos os $\alpha_{\lambda\mu}$ são iguais a zero.

Para cada modo de ordem λ há, em geral, $2\lambda + 1$ parâmetros, correspondendo a $\mu = -\lambda, -\lambda + 1, \dots, \lambda$. Porém, razões de simetria reduzem o número de parâmetros independentes como descrito na próxima seção. Os $\alpha_{\lambda\mu}(t)$ são parâmetros de deformação, que podem ser constantes, para descrever uma forma fixa, ou dependentes do tempo, para descrever movimento tal como uma rotação ou vibração. No presente trabalho, nosso interesse estará fixado nas formas dos núcleos deformados e não na variação delas ao longo do tempo. Portanto, nossos parâmetros de deformação vão ser considerados fixos.

1.1.1 Algumas propriedades dos coeficientes $\alpha_{\lambda\mu}$

a. **Conjugação complexa:** O raio nuclear deve ser real, ou seja,

$$R(\theta, \phi, t) = R^*(\theta, \phi, t) \quad (1.1.2)$$

daqui e de (1.1.1) temos que

$$\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^*(t) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = \left[\sum_{\lambda=0}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}(t) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \right]^* \quad (1.1.3)$$

Usando as propriedades dos harmônicos esféricos

$$Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) = (-1)^\mu Y_{\lambda-\mu}^*(\theta, \phi) \quad (1.1.4)$$

é claro que

$$\alpha_{\lambda\mu}^* = (-1)^\mu \alpha_{\lambda-\mu} \quad (1.1.5)$$

- b. **Caráter tensorial esférico:** O comportamento dos $\alpha_{\lambda\mu}$ sob rotações segue da invariância da função $R(\theta, \phi, t)$. Essa invariância é garantida se o conjunto de parâmetros $\alpha_{\lambda\mu}$, com $\mu = -\lambda, \dots, \lambda$, transforma-se, em uma rotação do sistemas de coordenadas, como um tensor esférico com momento angular λ . Mais exatamente,

$$\alpha_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) a_{\lambda\mu'} \quad (1.1.6)$$

onde a quantidade $D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ é a matriz de rotação, também chamada de *função D de Wigner* [EG70]; $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ é a parametrização da rotação no espaço, cujo conjunto de ângulos mais comumente utilizados são os chamados *ângulos de Euler*; e $a_{\lambda\mu'}$ são os parâmetros de deformação no sistema rodado. Na seção 1.3, apresenta-se detalhes sobre $D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ e transformações de sistemas de coordenadas.

- c. **Paridade:** Se os esféricos harmônicos são refletidos, o tensor $\alpha_{\lambda\mu}$ deve ser submetido a uma troca de sinal para preservar a invariância da superfície. Como os esféricos harmônicos têm uma paridade $(-1)^\lambda$, então também $\alpha_{\lambda\mu}$ deverá tê-la.

1.2 Tipos de deformações

Modo de monopolo, $\lambda = 0$:

O harmônico esférico $Y_{00}(\theta, \phi)$ é constante e igual a $\frac{1}{\sqrt{4\pi}}$. Então, um valor não nulo de α_{00} corresponde a uma mudança do raio da esfera e, portanto, à variação do volume nuclear (vide Figura 1.2.1). Dessa maneira, o parâmetro α_{00} é muitas vezes utilizado para obter conservação de volume. Ou seja, se considerarmos que o núcleo é incompressível, devemos impor que o volume seja independente da deformação e igual ao

correspondente volume do núcleo esférico. Assim temos:

$$V = \int d\Omega \int_0^{R(\Omega)} r^2 dr = \int \frac{R^3(\Omega)}{3} d\Omega = \frac{4}{3}\pi R_0^3 \quad (1.2.1)$$

sendo $d\Omega = \sin \theta d\theta d\phi$, $\Omega = (\theta, \phi)$ e $R(\Omega)$ dado pela equação (1.1.1). Na equação (1.2.1) está implícito que a densidade nuclear considerada é constante no volume todo e cai abruptamente a zero na superfície. Impondo a equação (1.2.1) até segunda ordem na deformação, obtemos [EG70, GMB97]:

$$\alpha_{00} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \sum_{\lambda=2}^{\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} |\alpha_{\lambda\mu}|^2 \quad (1.2.2)$$

Figura 1.2.1: Modos de deformação nuclear. A linha tracejada representa o núcleo esférico, enquanto a linha cheia representa o núcleo deformado para os modos: $\lambda = 0, 1, 2, 3$.

Deformação de dipolo, $\lambda = 1$:

Para pequenas deformações, os termos de $\alpha_{\lambda\mu}$, com $\lambda = 1$, descrevem principalmente o deslocamento do núcleo como um todo e não correspondem realmente a uma deformação nuclear (vide Figura 1.2.1). Os 3 parâmetros $\alpha_{1\mu}$ podem ser fixados exigindo que o centro de massa coincida com a origem do sistema de coordenadas. Dessa forma, devemos ter:

$$\vec{r}_{c.m.} = \frac{\int \vec{r} \rho(\vec{r}) d\vec{r}}{\int \rho(\vec{r}) d\vec{r}} = 0 \quad (1.2.3)$$

onde $\rho(\vec{r})$ é a densidade do núcleo. A expressão (1.2.3) é muitas vezes utilizada para expressar a dependência dos $\alpha_{1\mu}$ em função dos outros $\alpha_{\lambda\mu}$.

Deformação de quadrupolo ($\lambda = 2$) e de octupolo ($\lambda = 3$) :

São os modos mais relevantes no que diz respeito a vibrações e rotações de núcleos

deformados par-par e estão associados com estados excitados de baixas energias. A deformação de quadrupolo ($\lambda = 2$) é a deformação mais importante para excitações coletivas dos núcleos. Para núcleos par-par, o menor estado vibracional relacionado a essa deformação é criado por um único fônon e tem momento angular e paridade (2^+). A deformação de octupolo ($\lambda = 3$) representa os principais modos assimétricos do núcleo, associados com bandas de paridade negativa como, por exemplo, os estados (3^-) [BJ95].

1.3 Sistemas de coordenadas: laboratório e intrínseco

Temos dois sistemas de coordenadas diferentes para trabalhar. O *sistema de coordenadas intrínseco*, com o marco de referência fixado no corpo que roda, é útil para descrever a simetria do objeto. Por outro lado, o núcleo está rodando no sistema de laboratório e, portanto, é também conveniente descrevê-lo nesse sistema. O raio nuclear, $R(\theta, \phi)$, deve permanecer invariante sob qualquer rotação do sistema de coordenadas. Com isso, a transformação das coordenadas do sistema intrínseco para o de laboratório é dada pela equação (1.1.6) que é reproduzida abaixo:

$$\alpha_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) a_{\lambda\mu'} \quad (1.3.1)$$

A convenção que vamos seguir neste trabalho é designar as coordenadas no sistema de laboratório pela letra grega “ $\alpha_{\lambda\mu}$ ” e as coordenadas no sistema intrínseco pela letra latina “ $a_{\lambda\mu}$ ”.

O deslocamento geral de um corpo rígido, devido à rotação ao redor de um ponto fixo, pode ser obtido desenvolvendo três rotações ao redor de dois de três eixos mutuamente perpendiculares, fixos no marco de referência do corpo que roda. Assumiremos que o sistema de referência é de *mão direita* e que todas as rotações são desenvolvidas em sentido anti-horário. Essas três rotações são usualmente definidas pelos chamados *ângulos de Euler*, $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, que são definidos como [EG70, GMB97]:

1. Uma rotação $0 \leq \theta_1 \leq 2\pi$ ao redor do eixo- z , produzindo novos eixos: x', y' e z' .

2. Uma segunda rotação $0 \leq \theta_2 \leq \pi$ ao redor do novo eixo- y' . Isso produz (x'', y'', z'') .
3. Por último, uma rotação $0 \leq \theta_3 \leq 2\pi$ ao redor do novo eixo- z''

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

As funções de Wigner são escritas em função dos ângulos de Euler como [EG70]:

$$D_{\mu\mu'}^\lambda(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \exp(-i\mu\theta_1) \exp(-i\mu'\theta_3) \times \left[\sum_s \frac{(-1)^s [(\lambda + \mu')! (\lambda - \mu')! (\lambda + \mu)! (\lambda - \mu)!]^{1/2}}{s! (\lambda - s - \mu)! (\lambda - s + \mu') (\mu + s - \mu')!} \times \left(\cos \frac{\theta_2}{2} \right)^{2\lambda + \mu' - \mu - 2s} \left(-\sin \frac{\theta_2}{2} \right)^{\mu - \mu' + 2s} \right] \quad (1.3.2)$$

aqui s toma valores inteiros positivos ou zero, tais que nenhum fatorial seja negativo, sendo os limites:

$$\text{inferior:} \quad s \geq \begin{cases} 0 \\ \mu' - \mu \end{cases} \quad (\text{o que for maior}) \quad (1.3.3)$$

$$\text{superior:} \quad s \leq \begin{cases} j - \mu \\ j - \mu' \end{cases} \quad (\text{o que for menor}) \quad (1.3.4)$$

1.3.1 Um exemplo: caso quadrupolar

O tipo de deformação mais simples e que acontece mais frequentemente nos núcleos é a quadrupolar. Por isso, ela é um bom exemplo para ilustrar a ideia central das transformações entre sistemas de coordenadas.

Para descrever o raio do núcleo com uma deformação de quadrupolo pura, nos sistemas de laboratório e intrínseco, escrevemos:

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left[1 + \sum_{\mu=-2}^2 \alpha_{2\mu}^* Y_{2\mu}(\theta_L, \phi_L) \right] = R_0 \left[1 + \sum_{\mu'=-2}^2 a_{2\mu'}^* Y_{2\mu'}(\theta_I, \phi_I) \right] \quad (1.3.5)$$

onde (θ_L, ϕ_L) descreve a direção de um ponto na superfície no sistema de laboratório, enquanto (θ_I, ϕ_I) descreve a direção do mesmo ponto mas no sistema intrínseco. O esquema desta situação pode ser visto na Figura 1.3.1. Nesse caso, a transformação dos parâmetros

Figura 1.3.1: Esquema de uma colisão nuclear em que um dos núcleos é deformado. θ_i representa o conjunto de ângulos de Euler entre os sistemas intrínseco e de laboratório. A figura mostra o raio do núcleo deformado em uma certa direção espacial que pode ser descrito pelas equações (1.3.5) nos dois sistemas de referência. $\vec{R}$ é o vetor que une os centros de massa dos dois núcleos.

de deformação é dada pela rotação:

$$\alpha_{2\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{2*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) a_{2\mu'} \quad (1.3.6)$$

Dado que tanto $\alpha_{\lambda\mu}$ quanto $a_{\lambda\mu}$ são variáveis complexas, os $\alpha_{2\mu}$ da equação (1.3.5) contêm 10 números: partes real e imaginária para cada valor de μ . No entanto, devido à condição (1.1.5), esses números estão relacionados, restando somente 5 números independentes para os $\alpha_{2\mu}$. Como a equação (1.3.6) envolve 3 números independentes, os ângulos de Euler θ_1, θ_2 e θ_3 , então sobram apenas dois valores independentes para o conjunto de números $a_{2\mu}$. Normalmente utiliza-se:

$$a_{20} \quad (1.3.7a)$$

$$a_{2-2} = a_{22} \quad (1.3.7b)$$

$$a_{2-1} = a_{21} = 0 \quad (1.3.7c)$$

De fato, qualquer formato quadrupolar pode ser descrito, no sistema de laboratório, através dos valores de cinco parâmetros (reais), que são: a_{20} , a_{22} , θ_1 , θ_2 e θ_3 .

Em vez de a_{20} e a_{22} , é comum usar as variáveis β_2 e γ . Elas são definidas pelas relações:

$$a_{20} = \beta_2 \cos \gamma \quad (1.3.8a)$$

$$a_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta_2 \sin \gamma \quad (1.3.8b)$$

Aqui, β_2 é um parâmetro que descreve a magnitude da deformação, enquanto γ descreve o grau de simetria na forma do núcleo. Usando β_2 e γ , a superfície nuclear pode ser escrita no sistema intrínseco como:

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left\{ 1 + \beta_2 \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left[\cos \gamma (3 \cos^2 \theta - 1) + \sqrt{3} \sin \gamma \sin^2 \theta \cos 2\phi \right] \right\} \quad (1.3.9)$$

Se $\beta_2 = 0$, a superfície do núcleo, representada pela equação (1.3.9), é uma esfera de raio R_0 .

Existiria certo grau de redundância se os parâmetros β_2 e γ pudessem assumir valores nos intervalos: $-\infty \leq \beta \leq \infty$ e $0 \leq \gamma < 2\pi$ [Won08]. Por essa razão, vamos usar a convenção na qual $\beta_2 \geq 0$ e $0 \leq \gamma \leq \frac{\pi}{3}$. Para $\gamma = 0$, um esferóide prolato (forma de charuto) com um eixo de simetria ao longo do eixo- z é descrito; enquanto para $\gamma = \frac{\pi}{3}$ é descrito um esferóide oblato (forma de disco) com um eixo de simetria ao longo do eixo- y , como é ilustrado na Figura 1.3.2.

Figura 1.3.2: Plano $\beta - \gamma$ onde são indicados os diferentes tipos de formas para a deformação de quadrupolo. Para $\gamma = 0$, temos um esferóide prolato com um eixo de simetria ao longo do eixo- z , e para $\gamma = \frac{\pi}{3}$, um esferóide oblato com um eixo de simetria ao longo do eixo- y .

O fator $\frac{1}{\sqrt{2}}$ na equação (1.3.8b) foi escolhido tal que:

$$\sum_{\mu} |\alpha_{2\mu}|^2 = \sum_{\mu'} |a_{2\mu'}|^2 = \beta_2^2 \quad (1.3.10)$$

1.4 GRVM e proposta desenvolvida

Para o desenvolvimento dos cálculos e aproximações feitas nesta dissertação, vamos-nos guiar e ter como referência principal o artigo “*Systematics of nuclear densities, deformations and excitation energies within the context of the generalized rotation-vibration model*” [CC10]. Esse é um artigo sobre estrutura nuclear, mas voltado para posteriores usos no cálculo de canais acoplados. Vale a pena ressaltar que o artigo propõe um modelo (GRVM) que leva em conta parâmetros e termos que não são usualmente considerados na literatura, como por exemplo, termos de segunda ordem na deformação e densidades nucleares com valor de difusividade finita. Um dos propósitos desta dissertação é mostrar a importância que têm, no cálculo dos potenciais nuclear e coulombiano, os termos de segunda ordem na deformação e o uso de um valor de difusividade não nula nas densidades nucleares.

1.4.1 Densidades do núcleo, difusividade e distribuição de Fermi

Dentro do contexto de potenciais de convolução, o cálculo do potencial coulombiano é realizado através da convolução das densidades de carga dos núcleos com a interação coulombiana efetiva entre elementos infinitesimais de carga. Nesse cenário, a multiplicação da densidade de carga pelo elemento de volume fornece a quantidade de carga dentro desse elemento. Para o cálculo do potencial nuclear, iremos assumir o potencial de São Paulo [CCG⁺02], em que utilizam-se as densidades de matéria dos núcleos e uma interação efetiva de alcance nulo. Detalhes sobre a distinção entre distribuição de núcleons e densidade de matéria podem ser obtidos em [CCG⁺02].

Para efeito de cálculo de potencial coulombiano, é comum assumir, como aproximação, que as densidades nucleares podem ser representadas por uma função degrau (*step function*):

$$\rho(\vec{r}) = \begin{cases} \rho_0 & \text{para } r \leq R(\Omega) \\ 0 & \text{para } r > R(\Omega) \end{cases} \quad (1.4.1)$$

Em uma visão mais realística e moderna, a densidade não é tão homogênea assim, e pode ser descrita mais apropriadamente por uma função de distribuição de Fermi (2pF) (*two-parameter Fermi distribution*) [VJV87], como:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left[\frac{r-R(\Omega)}{a}\right]} \quad (1.4.2)$$

onde $R(\Omega)$ é o raio do núcleo que pode depender da direção espacial. No caso de um núcleo esférico, $R(\Omega) = R_0$. O parâmetro a está ligado à difusividade da superfície nuclear.

A ideia de assumir o núcleo como uma gota líquida surgiu de considerações a respeito das propriedades de saturação, da baixa compressibilidade do núcleo e de superfície bem definida. A propriedade de saturação corresponde ao fato de que a densidade de núcleons é aproximadamente constante no interior do núcleo, e cai de uma maneira relativamente abrupta na superfície [RS80]. A função de Fermi, equação (1.4.2), descreve essas propriedades com uma forma da densidade aproximadamente constante no interior nuclear e decrescente na superfície, como ilustra a Figura 1.4.1.

Figura 1.4.1: Exemplo de função de distribuição de Fermi para densidades nucleares.

Os valores das difusividades nucleares deste trabalho são obtidas de acordo com o modelo GRVM [CC10] através de:

$$a = 0.50 + 0.00018 A \quad (fm) \quad (1.4.3)$$

sendo A o número de massa nuclear.

Da mesma forma, o parâmetro R_0 na equação (1.1.1) é obtido:

- Para a densidade de carga

$$R_0 = 1.67 Z^{1/3} + 0.57(N^{1/3} - Z^{1/3}) - 0.97 \quad (fm) \quad (1.4.4)$$

onde Z e N são o número de prótons e nêutrons, respectivamente, do núcleo.

- Para a densidade de matéria

$$R_0 = \frac{N \times R_{\text{nêutrons}} + Z \times R_{\text{prótons}}}{N + Z} \quad (1.4.5)$$

onde

$$R_{\text{nêutrons}} = 1.67 N^{1/3} + 0.57(Z^{1/3} - N^{1/3}) - 0.97 \quad (fm) \quad (1.4.6)$$

e

$$R_{\text{prótons}} = 1.67 Z^{1/3} + 0.57(N^{1/3} - Z^{1/3}) - 0.97 \quad (fm) \quad (1.4.7)$$

O valor de ρ_0 é dado pela condição de normalização:

$$\int \rho(\vec{r}) d\vec{r} = \begin{cases} A \\ Z \end{cases} \quad (1.4.8)$$

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

Devido à incompressibilidade da matéria nuclear, ρ_0 vai ser calculado assumindo que o volume do núcleo não muda com a deformação e então podemos assumir em (1.4.8) a densidade esférica:

$$4\pi \rho_0 \int \frac{r^2}{1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})} dr = \begin{cases} A \\ Z \end{cases} \quad (1.4.9)$$

1.4.2 Aproximações estudadas e parâmetros de deformação

Para começar falando sobre as aproximações feitas neste trabalho, vamos-nos referir ao raio. No modelo GRVM, a expansão do raio (1.1.1) em multipolos é feita só até o termo octupolar ($\lambda = 3$). Então podemos escrever:

$$R(\Omega) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda=0}^3 \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega) \right] \quad (1.4.10)$$

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

$$a_{20} = \beta_2 \cos \gamma \quad (1.4.11a)$$

$$a_{2-2} = a_{22} = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta_2 \sin \gamma \quad (1.4.11b)$$

$$a_{2-1} = a_{21} = 0 \quad (1.4.11c)$$

Para o modo octupolar, é assumido que as coordenadas no sistema de referência intrínseco

são caracterizadas só por $a_{30}=\beta_3$, com $\beta_3 \geq 0$, e que todos os outros $a_{3\mu} = 0$.

$$a_{30} = \beta_3 \quad (1.4.12a)$$

$$a_{3-3} = a_{33} = 0 \quad (1.4.12b)$$

$$a_{3-2} = a_{32} = 0 \quad (1.4.12c)$$

$$a_{3-1} = a_{31} = 0 \quad (1.4.12d)$$

A ligação entre as coordenadas no sistema intrínseco e as coordenadas no sistema de laboratório é dada pela equação (1.1.6), que repito aqui:

$$\alpha_{\lambda\mu} = \sum_{\mu'} D_{\mu\mu'}^{\lambda*}(\theta_k^{(\lambda)}) a_{\lambda\mu'} \quad (1.4.13)$$

Usamos o índice λ em $\theta_k^{(\lambda)}$ -ângulos de Euler- já que os modos de quadrupolo e octupolo são totalmente independentes e, por conseguinte, os ângulos de Euler correspondentes não necessariamente coincidem.

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

Utilizando a distribuição de Fermi (1.4.2) na equação (1.2.1), além da função $C(x)$ definida em [CCG⁺02], que foi usada para calcular integrais que envolvem funções de Fermi, obtém-se [CC10]:

$$\alpha_{00} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{\left(1 + \frac{77a^2}{24R_0^2}\right)} \sum_{\lambda=2}^3 |\alpha_{\lambda\mu}|^2 \quad (1.4.14)$$

Pode ser mostrado que $\sum_{\lambda=2}^3 |\alpha_{\lambda\mu}|^2 = \beta_2^2 + \beta_3^2$. Assim, obtemos finalmente:

$$\alpha_{00} = -\frac{1}{\sqrt{4\pi}} \frac{1}{\left(1 + \frac{77a^2}{24R_0^2}\right)} (\beta_2^2 + \beta_3^2) \quad (1.4.15)$$

Usando a condição (1.2.3), podemos calcular $\alpha_{1\mu}$:

$$\alpha_{10} = -\frac{3}{10} \sqrt{\frac{3}{7\pi}} \frac{\left(1 + \frac{77a^2}{24R_0^2}\right)}{\left(1 + \frac{77a^2}{8R_0^2} + \frac{11a^3}{24R_0^3}\right)} \left[3\sqrt{5}\alpha_{20}\alpha_{30} + 2\sqrt{10}(\alpha_{21}\alpha_{31}^* + \alpha_{21}^*\alpha_{31}) + 5(\alpha_{22}\alpha_{32}^* + \alpha_{22}^*\alpha_{32})\right] \quad (1.4.16)$$

$$\alpha_{11} = \frac{3}{10} \sqrt{\frac{3}{7\pi}} \frac{\left(1 + \frac{77a^2}{24R_0^2}\right)}{\left(1 + \frac{77a^2}{8R_0^2} + \frac{11a^3}{24R_0^3}\right)} \left[\sqrt{15} \alpha_{30} \alpha_{21} - \sqrt{30} \alpha_{20} \alpha_{31} + \sqrt{5} \alpha_{22} \alpha_{31}^* - 5\sqrt{2} \alpha_{21}^* \alpha_{32} - 5\sqrt{3} \alpha_{22}^* \alpha_{33} \right] \quad (1.4.17)$$

Essas expressões são totalmente equivalentes às equações (3)-(6) da referência [CC10].

Observe a presença da difusividade a nas equações (1.4.15), (1.4.16) e (1.4.17). Essa é uma característica do modelo GRVM que leva em consideração a difusividade nuclear. Na maioria dos outros modelos, utilizam-se expressões semelhantes a essas, mas com $a = 0$.

Para finalizar este capítulo, vamos apresentar as expressões para as expansões das densidades, com as aproximações próprias do modelo GRVM, que serão usadas no próximo capítulo.

Partindo da densidade expressa mediante a equação (1.4.2), reproduzida aqui,

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left[\frac{r - R(\Omega)}{a}\right]} \quad (1.4.18)$$

podemos escrever $R(\Omega)$, da equação (1.4.10), como:

$$R(\Omega) = R_0(1 + \eta) \quad (1.4.19)$$

onde

$$\eta = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=-l}^l \alpha_{lm}^* Y_{lm}(\Omega) \quad (1.4.20)$$

Daqui, podemos escrever $\rho(\vec{r})$ como função de r e η

$$\rho(\vec{r}) \equiv \rho(r, \eta) \quad (1.4.21)$$

e, dado que η é a deformação do núcleo e pode ser considerada pequena, podemos expandir a densidade em uma série de potências até segunda ordem nas deformações ao redor de $\eta = 0$.

$$\rho(r, \eta) \cong \rho(r, \eta)|_{\eta=0} + \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} \times \delta_1 + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} \times \delta_2 \quad (1.4.22)$$

sendo

$$\delta_1 = \sum_{lm} \alpha_{lm}^* Y_{lm}(\Omega) \quad (1.4.23a)$$

$$\delta_2 = \sum_{l_a m_a} \sum_{l_b m_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* Y_{l_a m_a}(\Omega) Y_{l_b m_b}(\Omega) \quad (1.4.23b)$$

e

$$\rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} = \frac{\rho_0}{1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})} \quad (1.4.24a)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} = \frac{\rho_0 R_0}{a} \frac{\exp(\frac{r-R_0}{a})}{\left[1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]^2} \quad (1.4.24b)$$

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} = -\frac{\rho_0 R_0^2}{a^2} \frac{\exp(\frac{r-R_0}{a}) \left[1 - \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]}{\left[1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]^3} \quad (1.4.24c)$$

δ_1 contém termos em primeira ordem ($\alpha_{2\mu}$ e $\alpha_{3\mu}$) e em segunda ordem (α_{00} e $\alpha_{1\mu}$), enquanto δ_2 têm apenas termos de segunda ordem, com $l_a = 2, 3$ e $l_b = 2, 3$.

Capítulo 2

Cálculos dos potenciais coulombiano e nuclear

Como comentado na introdução, muitas vezes os potenciais acoplados são obtidos através da convolução de potenciais (nuclear e coulombiano) deformados com as respectivas funções de onda das coordenadas de deformação. Isso resulta em integrais multidimensionais. Apenas a título de exemplo, suponha um núcleo com deformações quadrupolar e octupolar. São cinco coordenadas de quadrupolo (β_2, γ e ângulos de Euler), e quatro de octupolo (β_3 e ângulos de Euler), em um total de 9 coordenadas. Se os dois núcleos forem deformados esse número aumenta para 18. Ou seja, para obter os potenciais de acoplamento seria necessário resolver uma integral de dimensão 18. Obviamente, um cálculo numérico desse tipo é totalmente inviável. Por isso, é conveniente escrever os potenciais deformados de tal forma que essa integral possa ser resolvida, pelo menos em parte, de forma analítica.

Neste capítulo, desenvolveremos cálculos de potenciais nuclear e coulombiano, para sistemas que envolvem núcleos deformados, de acordo com o GRVM. No que segue vamos assumir a seguinte notação:

$$V_D = V_{ND} + V_{cor} \quad (2.0.1)$$

sendo V_D o *potencial deformado*, V_{ND} o *potencial não deformado* (que é obtido com densidades esféricas) e V_{cor} o *potencial de correção* devido à deformação. Então, V_{cor} vai ser definido simplesmente como:

$$V_{cor} = V_D - V_{ND} \quad (2.0.2)$$

Nas análises que serão feitas no próximo capítulo, centraremos nossa atenção sobre V_{cor} , já que nele é que se apresentam os efeitos devidos à deformação.

2.1 Algumas aproximações usadas frequentemente

Dois tipos de aproximações, uma para o caso nuclear e outra para o coulombiano, são muito utilizadas em grande parte das aplicações em cálculos de canais acoplados. A seguir vamos apresentá-las de forma breve.

2.1.1 Caso nuclear

A força nuclear é de muito curto alcance e, por tal razão, deve ser principalmente uma função da distância entre as superfícies dos núcleos S . O potencial nuclear pode ser expresso, então, como função de S : $V_D(S)$, onde $S = (R - R_1 - R_2)$. O esquema é apresentado na Figura 2.1.1.

Figura 2.1.1: Esquema da colisão de dois núcleos deformados. S é a distância entre as superfícies dos núcleos, enquanto $R = |\vec{R}|$ é a distância entre seus centros de massa. R_1 e R_2 são os raios dos núcleos na direção de $\vec{R}$. As linhas tracejadas representam núcleos esféricos, de raios R_{01} e R_{02} . Δ_1 e Δ_2 representam a diferença entre os raios dos núcleos esférico e deformado.

Se expressamos a distância S como uma função das projeções das deformações das superfícies nucleares na direção do vetor $\vec{R}$ (eixo- z), $\Delta_1 = [R_1(\theta = 0, \phi) - R_{01}]$ e $\Delta_2 = [R_2(\theta = \pi, \phi) - R_{02}]$, podemos escrever:

$$S = R - R_{01} - R_{02} - \Delta_1 - \Delta_2 \quad (2.1.1)$$

R_{01} e R_{02} são os raios não deformados dos dois núcleos e $R = |\vec{R}|$ a distância entre os centros dos dois núcleos. Daqui, escrevemos o potencial nuclear como:

$$V_D(S) \cong V_D(R - R_{01} - R_{02} - \Delta_1 - \Delta_2) \quad (2.1.2)$$

Podemos realizar uma expansão do potencial nas deformações (e.g. [CNC09]), de forma análoga à feita para as densidades (vide equação (1.4.22)), considerando $\Delta = \Delta_1 + \Delta_2$:

$$V_D(R, \Delta) \cong V_{ND}(R) + \sum_n (-1)^n \frac{\Delta^n}{n!} \frac{\partial^n V_{ND}(R)}{\partial R^n} \quad (2.1.3)$$

onde $V_{ND}(R)$ é o potencial nuclear não deformado, que pode ser da forma de um potencial *Woods-Saxon* ou de um potencial *double-folding*.

Considerando termos só até segunda ordem na deformação na equação (2.1.3), vamos ter:

$$V_D(R, \Delta_1, \Delta_2) \cong V_{ND}(R) - \frac{\partial V_{ND}(R)}{\partial R} \times (\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_{ND}(R)}{\partial R^2} \times (\Delta_1 + \Delta_2)^2 \quad (2.1.4)$$

com

$$\Delta_i = \sum_{l=0}^3 \sum_{m=-l}^l \alpha_{lm}^* Y_{lm}(\theta, \phi) R_{0i} \quad (2.1.5)$$

onde $\theta = 0$ para o núcleo 1 e $\theta = \pi$ para o núcleo 2. Então escrevemos V_{cor} como

$$V_{cor}(R) = -\frac{\partial V_{ND}(R)}{\partial R} \times (\Delta_1 + \Delta_2) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 V_{ND}(R)}{\partial R^2} \times (\Delta_1^2 + \Delta_2^2 + 2\Delta_1\Delta_2). \quad (2.1.6)$$

O termo Δ_i possui parâmetros de deformação α_{lm} em primeira ordem ($l = 2, 3$) e em segunda ordem ($l = 0, 1$). Isso deve ser levado em consideração ao calcular a correção do potencial em primeira ou segunda ordem.

2.1.2 Caso coulombiano

No caso coulombiano, é usual a expansão do potencial em multipolos até primeira ordem na deformação (e.g. [TRI00]). O termo de monopolo é muitas vezes aproximado para:

$$V_{ND}(R) = Z_1 Z_2 e^2 \begin{cases} \frac{1}{R} & \text{para } R > R_C, \\ \frac{1}{2R_C} \left(3 - \frac{R^2}{R_C^2}\right) & \text{para } R < R_C. \end{cases} \quad (2.1.7)$$

onde $R_C = R_{01} + R_{02}$. Para a correção em primeira ordem, obtemos:

$$V_{cor}(R) = Z_1 Z_2 e^2 \left\{ \sum_{\lambda=2}^3 F_{\lambda}(R) \sum_{\mu} \left[\underbrace{\alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(0, \phi) \left(\frac{R_{01}}{R_C}\right)^2}_{\text{núcleo 1}} + \underbrace{\alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\pi, \phi) \left(\frac{R_{02}}{R_C}\right)^2}_{\text{núcleo 2}} \right] \right\} \quad (2.1.8)$$

onde

$$F_{\lambda}(R) = \frac{3}{2\lambda + 1} \begin{cases} \frac{R_C^{\lambda}}{R^{\lambda+1}} & \text{para } R > R_C, \\ \frac{R^{\lambda}}{R_C^{\lambda+1}} & \text{para } R < R_C. \end{cases} \quad (2.1.9)$$

2.2 Potenciais de dupla convolução

Para descrever a interação entre dois núcleos vamos usar o modelo de dupla convolução [SL79]. Nesse modelo, os potenciais podem ser escritos como:

$$V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) = \int \rho_1(\vec{r}_1, \alpha_1) \rho_2(\vec{r}_2, \alpha_2) v(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.2.1)$$

onde $\vec{R}$ é o vetor posição do centro de massa de um núcleo em relação ao outro (ver Figura 2.2.1) e, portanto, descreve o movimento relativo. α_1 e α_2 representam o conjunto total de coordenadas de deformação, intrínsecas, as quais estão embutidas nas densidades ρ_1 e ρ_2 . O termo $v(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1)$ é o potencial de interação entre dois elementos infinitesimais de volume nas posições $\vec{r}_1$ e $\vec{r}_2$. Dado que há uma integração sobre duas densidades, esse modelo é chamado de dupla convolução (*double-folding*).

Para densidades deformadas, a solução computacional da equação (2.2.1) pode tomar muito tempo por causa da integral sêxtupla. Isso se torna um problema em estudos onde o

Figura 2.2.1: Definição das coordenadas usadas na construção do potencial de dupla convolução. Os círculos 1 e 2 representam os dois núcleos envolvidos na colisão.

potencial deve ser calculado várias vezes. Portanto, métodos mais rápidos para obter boas aproximações a potenciais deformados são muito convenientes. Essa é, de fato, a principal motivação deste trabalho.

A expressão (2.2.1) pode ser trabalhada no espaço de momentos, reduzindo-se a um produto de integrais de uma menor dimensão. Frequentemente, uma o mais dessas integrais não precisam ser calculadas numericamente, se formas analíticas para a transformada de Fourier existirem. Conforme o artigo de Satchler e Love [SL79], vamos definir a transformada de Fourier de uma função $f(\vec{r})$ como:

$$\tilde{f}(\vec{k}) = \int f(\vec{r}) e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (2.2.2)$$

onde a transformada inversa é dada por:

$$f(\vec{r}) = \frac{1}{8\pi^3} \int \tilde{f}(\vec{k}) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} d\vec{k} \quad (2.2.3)$$

Então, $V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2)$ da equação (2.2.1) pode ser escrita como

$$V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) = \frac{1}{8\pi^3} \int \tilde{v}(\vec{k}) \rho_1(\vec{r}_1, \alpha_1) \rho_2(\vec{r}_2, \alpha_2) e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1)} d\vec{k} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.2.4)$$

Nesse caso, para a interação coulombiana:

$$v(\vec{r}) = \frac{e^2}{r}, \quad \tilde{v}(\vec{k}) = \frac{4\pi e^2}{k^2} \quad (2.2.5)$$

Para a interação nuclear seguimos o Potencial São Paulo [CCG⁺02], que assume uma interação de alcance nulo:

$$v(\vec{r}) = V_0 \delta(\vec{r}), \quad \tilde{v}(\vec{k}) = V_0 \quad (2.2.6)$$

Agora faremos uso da expansão da onda plana em ondas parciais (e.g. [TRI00, CCG04]),

$$e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} = 4\pi \sum_{\lambda\mu} i^\lambda j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_k) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) \quad (2.2.7)$$

e

$$\begin{aligned} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} &= 4\pi \sum_{\lambda\mu} (-1)^\lambda i^\lambda j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}(\Omega_k) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_r) \\ &= 4\pi \sum_{\lambda\mu} i^{-\lambda} j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}(\Omega_k) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_r) \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

onde $j_\lambda(kr)$ são as funções esféricas de Bessel e $Y_{\lambda\mu}$ os harmônicos esféricos.

Para as interações coulombiana e de alcance nulo, para as quais $v(\vec{r})$ não tem dependência com a parte angular, se substituirmos (2.2.7), (2.2.8) e $d\vec{k} = k^2 dk d\Omega_k$ em (2.2.4), podemos escrever:

$$\begin{aligned} V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) &= 8 \sum_{\lambda\lambda_1\lambda_2} \sum_{\mu\mu_1\mu_2} \left\{ i^{-\lambda-\lambda_2+\lambda_1} \int \tilde{v}(k) k^2 \right. \\ &\quad \times \int \rho_1(\vec{r}_1, \alpha_1) \rho_2(\vec{r}_2, \alpha_2) j_\lambda(kR) j_{\lambda_1}(kr_1) j_{\lambda_2}(kr_2) \\ &\quad \times Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_R) Y_{\lambda_1\mu_1}(\Omega_{r_1}) Y_{\lambda_2\mu_2}^*(\Omega_{r_2}) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 dk \left. \int Y_{\lambda\mu}(\Omega_k) Y_{\lambda_1\mu_1}^*(\Omega_k) Y_{\lambda_2\mu_2}(\Omega_k) d\Omega_k \right\} \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Definamos aqui, de maneira similar à feita em [CCG04], o coeficiente de acoplamento dos momentos angulares como:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & \mu \end{bmatrix} &= \int Y_{\lambda_1\mu_1}(\Omega) Y_{\lambda_2\mu_2}(\Omega) Y_{\lambda\mu}^*(\Omega) d\Omega \\ &= \sqrt{\frac{(2\lambda_1+1)(2\lambda_2+1)}{4\pi(2\lambda+1)}} C_{\mu_1\mu_2\mu}^{\lambda_1\lambda_2\lambda} C_{0\ 0\ 0}^{\lambda_1\lambda_2\lambda} \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

onde $C_{\mu_1\mu_2\mu}^{\lambda_1\lambda_2\lambda}$ é o coeficiente de Clebsch-Gordan que acopla os momentos angulares λ_1 e λ_2 , com projeções μ_1 e μ_2 respectivamente, para produzir um momento angular total λ e projeção μ [EG70]. Assim, a soma em (2.2.9) é limitada aos termos com $\mu_1 = \mu_2 + \mu$ e $|\lambda_2 - \lambda| \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 + \lambda$.

Também podemos definir os multipolos das densidades como:

$$M_{\lambda\mu}(k) = \int \rho(\vec{r}) j_{\lambda}(kr) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\vec{r} \quad (2.2.11)$$

Usando as equações (2.2.10)) e (2.2.11), podemos agora reescrever (2.2.9) como:

$$\begin{aligned} V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) = & 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu} \left\{ i^{-\lambda-\lambda_2+\lambda_1} Y_{\lambda\mu}^*(\Omega_R) \begin{bmatrix} \lambda & \lambda_2 & \lambda_1 \\ \mu & \mu_2 & \mu_1 \end{bmatrix} \right. \\ & \times \left. \int \tilde{v}(k) k^2 j_{\lambda}(kR) M_{\lambda_2\mu_2}^*(k) M_{\lambda_1\mu_1}(k) dk \right\} \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

No presente trabalho, estamos interessados apenas no cálculo dos potenciais. Então, sem perda de generalidade vamos assumir um sistema de coordenadas com o eixo- z na direção do vetor $\vec{R}$. Com isso vamos estabelecer o ângulo $\Omega_R \Rightarrow (\theta_R, \phi_R) = (0, \phi)$, para escrever o potencial dependendo só da distância R :

$$\begin{aligned} V(R, \alpha_1, \alpha_2) = & 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu} \left\{ i^{-\lambda-\lambda_2+\lambda_1} Y_{\lambda\mu}^*(0, \phi) \begin{bmatrix} \lambda & \lambda_2 & \lambda_1 \\ \mu & \mu_2 & \mu_1 \end{bmatrix} \right. \\ & \times \left. \int \tilde{v}(k) k^2 j_{\lambda}(kR) M_{\lambda_2\mu_2}^*(k) M_{\lambda_1\mu_1}(k) dk \right\} \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

Escrevendo $Y_{\lambda\mu}^*(0, \phi)$ como:

$$Y_{\lambda\mu}^*(0, \phi) = \begin{cases} 0 & \text{para } \mu \neq 0, \\ \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} & \text{para } \mu = 0. \end{cases} \quad (2.2.14)$$

e usando esse resultado em (2.2.13), obtemos:

$$\begin{aligned} V(R, \alpha_1, \alpha_2) = & 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \sum_{\mu_1 \mu_2} \left\{ i^{-\lambda-\lambda_2+\lambda_1} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \begin{bmatrix} \lambda & \lambda_2 & \lambda_1 \\ 0 & \mu_2 & \mu_1 \end{bmatrix} \right. \\ & \times \left. \int \tilde{v}(k) k^2 j_{\lambda}(kR) M_{\lambda_2\mu_2}^*(k) M_{\lambda_1\mu_1}(k) dk \right\} \end{aligned} \quad (2.2.15)$$

Para que o acoplamento dos momentos angulares seja não nulo, devemos impor $\mu_2 = \mu_1$, obtendo:

$$\begin{aligned} V(R, \alpha_1, \alpha_2) = & 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \sum_{\mu_1} \left\{ i^{-\lambda-\lambda_2+\lambda_1} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \begin{bmatrix} \lambda & \lambda_2 & \lambda_1 \\ 0 & \mu_1 & \mu_1 \end{bmatrix} \right. \\ & \times \left. \int \tilde{v}(k) k^2 j_{\lambda}(kR) M_{\lambda_2\mu_1}^*(k) M_{\lambda_1\mu_1}(k) dk \right\} \end{aligned} \quad (2.2.16)$$

O potencial deformado calculado com (2.2.11) e (2.2.16) é exato, não envolvendo nenhuma aproximação. O potencial não deformado, V_{ND} , pode ser obtido dessa mesma expressão, mas impondo densidades esfericamente simétricas (com $\alpha_{\lambda\mu} = 0$). Nesse caso obtemos:

$$V_{ND}(R) = \frac{2}{\pi} \int \tilde{v}(k) k^2 j_0(kR) \underbrace{M_{00}(k)}_{\text{núcleo 1}} \underbrace{M_{00}(k)}_{\text{núcleo 2}} dk \quad (2.2.17)$$

sendo $M_{00}(k) = \sqrt{4\pi} \int r^2 j_0(kr) \rho(r, \eta) \big|_{\eta=0} dr$

2.3 Aproximações feitas neste trabalho

Nesta seção, discutiremos diferentes aproximações que iremos estudar dentro do contexto do GRVM.

2.3.1 Difusividade nula

Na maioria das aplicações práticas (e.g. [TRI00]), para o cálculo do potencial coulombiano é assumido um objeto carregado uniformemente e com um corte abrupto na superfície (*sharp surface*), ou seja:

$$\rho(\vec{r}) = \rho_0 \Theta[R(\Omega) - r] \quad (2.3.1)$$

sendo $R(\Omega)$ dado pela equação (1.4.10) e $\Theta(x)$ a função degrau (1.4.1). Substituindo a aproximação de *sharp surface* na expressão (2.2.11) para os multipolos, podemos escrever:

$$M_{\lambda\mu}(k) = \frac{\rho_0}{k^3} \int Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) \int_0^{kR(\Omega_r)} z^2 j_\lambda(z) dz d\Omega_r \quad (2.3.2)$$

com $z = kr$.

Aqui podemos escrever $R(\Omega_r)$ como (1.4.19), que vamos usar para resolver a integral na variável z em (2.3.2). Definimos então:

$$F(y) = \int_0^y z^2 j_\lambda(z) dz \quad (2.3.3)$$

com

$$\begin{aligned}
y &= k R(\Omega_r) \\
&= k R_0(1 + \eta) \\
&= x(1 + \eta) \\
&= x + \eta'
\end{aligned} \tag{2.3.4}$$

sendo $\eta' = x\eta$, $x = kR_0$ e η definido pela equação (1.4.20). Dessa maneira, podemos calcular a expansão em série de Taylor até segunda ordem da função,

$$F(y) = F(x + \eta') \cong F(x) + \eta' \times F'(x) + \frac{(\eta')^2}{2} \times F''(x) + \dots \tag{2.3.5}$$

com

$$F(x) = \int_0^x z^2 j_\lambda(z) dz \tag{2.3.6a}$$

$$F'(x) = x^2 j_\lambda(x) \tag{2.3.6b}$$

$$F''(x) = 2x j_\lambda(x) + x^2 \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \tag{2.3.6c}$$

então escrevemos:

$$\int_0^y z^2 j_\lambda(z) dz = \int_0^x z^2 j_\lambda(z) dz + \eta' x^2 j_\lambda(x) + \frac{\eta'^2}{2} \left[2x j_\lambda(x) + x^2 \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \right] \tag{2.3.7}$$

Com a expressão anterior e levando em conta a definição de η em (1.4.20) e η' em (2.3.4), podemos calcular (2.3.2):

$$\begin{aligned}
M_{\lambda\mu}(k) &\cong \frac{\rho_0}{k^3} \int Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) \left\{ \int_0^x z^2 j_\lambda(z) dz + \eta' x^2 j_\lambda(x) + \frac{\eta'^2}{2} \left[2x j_\lambda(x) + x^2 \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \right] \right\} d\Omega_r \\
&\cong \frac{\rho_0}{k^3} \left\{ \int_0^x z^2 j_\lambda(z) dz \int Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r + x^3 j_\lambda(x) \sum_{l_a m_a} \alpha_{l_a m_a}^* \int Y_{l_a m_a}(\Omega_r) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r \right. \\
&\quad \left. + \frac{x^2}{2} \left[2x j_\lambda(x) + x^2 \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \right] \sum_{l_a m_a} \sum_{l_b m_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \int Y_{l_a m_a}(\Omega_r) Y_{l_b m_b}(\Omega_r) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r \right\}
\end{aligned} \tag{2.3.8}$$

Porém:

$$\int Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r = \sqrt{4\pi} \delta_{\lambda 0} \quad (2.3.9a)$$

$$\int Y_{l_a m_a}(\Omega_r) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r = (-1)^\mu \delta_{l_a \lambda} \delta_{m_a - \mu} \quad (2.3.9b)$$

$$\int Y_{l_a m_a}(\Omega_r) Y_{l_b m_b}(\Omega_r) Y_{\lambda\mu}(\Omega_r) d\Omega_r = (-1)^\mu \begin{bmatrix} l_a & l_b & \lambda \\ m_a & m_b & -\mu \end{bmatrix} \quad (2.3.9c)$$

que junto com a condição (1.1.5) dão como resultado:

$$\begin{aligned} M_{\lambda\mu}(k) \cong \frac{\rho_0}{k^3} & \left\{ \delta_{\lambda 0} \sqrt{4\pi} \int_0^x z^2 j_0(z) dz + \alpha_{\lambda\mu} x^3 j_\lambda(x) \right. \\ & \left. + \frac{x^2}{2} \left[2x j_\lambda(x) + x^2 \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \right] (-1)^\mu \sum_{\lambda_a \mu_a} \sum_{\lambda_b \mu_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \begin{bmatrix} l_a & l_b & \lambda \\ m_a & m_b & -\mu \end{bmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (2.3.10)$$

A integral $\int_0^x z^2 j_0(z) dz$ é facilmente calculada:

$$\int_0^x z^2 j_0(z) dz = x^2 j_1(x)$$

Para concluir o cálculo, tiramos o fator comum x^3 e substituímos a condição de normalização $\frac{4\pi}{3} R_o^3 \rho_0 = Z$, já que a difusividade é considerada nula. Fazemos $x = kR_0$, sendo R_0 o raio não deformado de cada núcleo. Então obtemos:

$$\begin{aligned} M_{\lambda\mu}(k) \cong \frac{3Z}{4\pi} & \left\{ \delta_{\lambda 0} \sqrt{4\pi} \frac{j_1(kR_0)}{kR_0} + \alpha_{\lambda\mu} j_\lambda(kR_0) \right. \\ & \left. + (-1)^\mu \left[j_\lambda(kR_0) + \frac{kR_0}{2} \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \Big|_{x=kR_0} \right] \sum_{l_a=2}^3 \sum_{m_a=-l_a}^{l_a} \sum_{l_b=2}^3 \sum_{m_b=-l_b}^{l_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \begin{bmatrix} l_a & l_b & \lambda \\ m_a & m_b & -\mu \end{bmatrix} \right\} \end{aligned} \quad (2.3.11)$$

Lembramos aqui que os α_{lm} com $l = 2, 3$ são termos de primeira ordem e que os nossos cálculos vão ser feitos no máximo até segunda ordem na deformação. Portanto, os valores que poderão tomar os índices l_a e l_b na somatória serão:

$$l_a = 2, 3 \quad (2.3.12a)$$

$$l_b = 2, 3 \quad (2.3.12b)$$

α_{00} e $\alpha_{1\mu}$, presentes em (2.3.11), são termos de segunda ordem na deformação.

Nesse caso, em que estamos considerando difusividade nula, os termos α_{00} e $\alpha_{1\mu}$ vão ser calculados com as equações (1.4.15), (1.4.16) e (1.4.17), fazendo $a = 0$.

2.3.2 Difusividade não nula

Para fazer um cálculo mais realístico, vamos considerar densidades da forma da função de Fermi :

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left[\frac{r-R(\Omega)}{a}\right]} \quad (2.3.13)$$

onde $R(\Omega)$ é dado pela expressão (1.4.10).

Usando a expansão de densidades do GRVM, expressa nas equações (1.4.22), (1.4.23a) e (1.4.23b); e particularizando para a distribuição de Fermi, conforme (1.4.24a), (1.4.24b) e (1.4.24c), a equação (2.2.11) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} M_{\lambda\mu}(k) &\cong \int \left\{ \rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} + \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} \sum_{l_a m_a} \alpha_{l_a m_a}^* Y_{l_a m_a}(\Omega) \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} \sum_{l_a=2}^3 \sum_{m_a=-l_a}^{l_a} \sum_{l_b=2}^3 \sum_{m_b=-l_b}^{l_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* Y_{l_a m_a}(\Omega) Y_{l_b m_b}(\Omega) \right\} j_\lambda(kr) Y_{\lambda\mu}(\Omega) r^2 dr d\Omega \\ &\cong \int r^2 j_\lambda(kr) \left\{ \rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} \int Y_{\lambda\mu}(\Omega) d\Omega + \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} \sum_{l_a m_a} \alpha_{l_a m_a}^* \int Y_{l_a m_a}(\Omega) Y_{\lambda\mu}(\Omega) d\Omega \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} \sum_{l_a=2}^3 \sum_{m_a=-l_a}^{l_a} \sum_{l_b=2}^3 \sum_{m_b=-l_b}^{l_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \int Y_{l_a m_a}(\Omega) Y_{l_b m_b}(\Omega) Y_{\lambda\mu}(\Omega) d\Omega \right\} dr \end{aligned} \quad (2.3.14)$$

Usando de novo as equações (2.3.9a), (2.3.9b), (2.3.9c), a condição (1.1.5) e definindo

$$\hat{\rho}(k) = \int r^2 j_0(kr) \rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} dr \quad (2.3.15)$$

obtemos finalmente,

$$\begin{aligned}
M_{\lambda\mu}(k) = & \sqrt{4\pi} \delta_{\lambda 0} \hat{\rho}(k) + \alpha_{\lambda\mu} \int r^2 j_\lambda(kr) \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} dr \\
& + \frac{(-1)^\mu}{2} \int r^2 j_\lambda(kr) \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} dr \sum_{l_a=2}^3 \sum_{m_a=-l_a}^{l_a} \sum_{l_b=2}^3 \sum_{m_b=-l_b}^{l_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \begin{bmatrix} l_a & l_b & \lambda \\ m_a & m_b & -\mu \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{2.3.16}$$

2.3.3 Forma unificada

Expressemos agora $M_{\lambda\mu}$, das equações (2.3.11) e (2.3.16) de forma unificada como:

$$M_{\lambda\mu}(k) = I^{(0)}(k) \delta_{\lambda 0} + I_\lambda^{(1)}(k) \alpha_{\lambda\mu} + I_\lambda^{(2)}(k) (-1)^\mu \sum_{l_a=2}^3 \sum_{m_a=-l_a}^{l_a} \sum_{l_b=2}^3 \sum_{m_b=-l_b}^{l_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \begin{bmatrix} l_a & l_b & \lambda \\ m_a & m_b & -\mu \end{bmatrix} \tag{2.3.17}$$

Para difusividade nula, os termos $I^{(0)}(k)$, $I_\lambda^{(1)}(k)$ e $I_\lambda^{(2)}(k)$ estão dados por:

$$I^{(0)}(k) = \frac{3Z}{4\pi} \sqrt{4\pi} \frac{j_1(kR_0)}{kR_0} \tag{2.3.18a}$$

$$I_\lambda^{(1)}(k) = \frac{3Z}{4\pi} j_\lambda(kR_0) \tag{2.3.18b}$$

$$I_\lambda^{(2)}(k) = \frac{3Z}{4\pi} \left[j_\lambda(kR_0) + \frac{kR_0}{2} \frac{\partial j_\lambda(x)}{\partial x} \Big|_{x=kR_0} \right] \tag{2.3.18c}$$

enquanto para difusividade não nula,

$$I^{(0)}(k) = \sqrt{4\pi} \hat{\rho}(k) \tag{2.3.19a}$$

$$I_\lambda^{(1)}(k) = \int r^2 j_\lambda(kr) \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} dr \tag{2.3.19b}$$

$$I_\lambda^{(2)}(k) = \frac{1}{2} \int r^2 j_\lambda(kr) \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} dr \tag{2.3.19c}$$

Pode-se notar que os termos $I^{(0)}(k)$, $I_\lambda^{(1)}(k)$ e $I_\lambda^{(2)}(k)$, nas duas equações, são números reais.

Visando posteriores usos dos potenciais aproximados calculados aqui no cálculo de canais acoplados, enfatizamos que as equações (2.3.17) e (2.2.12) expressam a dependência do potencial em função dos $\alpha_{\lambda\mu}$ através de uma forma bastante útil para o cálculo de potenciais de acoplamento. O mesmo não se pode dizer da expressão exata (2.2.11), em que a dependência com os $\alpha_{\lambda\mu}$ não é explícita.

2.4 Potencial nuclear exato

Para o potencial nuclear podemos fazer diretamente a integral sêxtupla da equação (2.2.1), sem precisar da transformada de Fourier.

$$V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) = \int \rho_1(\vec{r}_1, \alpha_1) \rho_2(\vec{r}_2, \alpha_2) v(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (2.4.1)$$

De fato, devido ao termo de alcance nulo,

$$v(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1) = V_0 \delta(\vec{R} + \vec{r}_2 - \vec{r}_1) \quad (2.4.2)$$

podemos expressar $\vec{r}_2$ como função de $\vec{r}_1$ e $\vec{R}$:

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_1 - \vec{R} \quad (2.4.3)$$

Com isso, a integral (2.4.1) reduz a dimensionalidade e torna-se uma integral tripla mais simples de resolver numericamente:

$$V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) = V_0 \int \rho_1(\vec{r}_1, \alpha_1) \rho_2(\vec{r}_1 - \vec{R}, \alpha_2) d\vec{r}_1 \quad (2.4.4)$$

Dado que o vetor $\vec{R}$ está na direção do eixo- z , podemos escrever as coordenadas cartesianas dos vetores $\vec{R}$ e $\vec{r}_1$ como:

$$\vec{R} = R \hat{k} \quad (2.4.5a)$$

$$X_1 = r_1 \sin \theta_1 \cos \phi_1 \hat{i} \quad (2.4.5b)$$

$$Y_1 = r_1 \sin \theta_1 \sin \phi_1 \hat{j} \quad (2.4.5c)$$

$$Z_1 = r_1 \cos \theta_1 \hat{k} \quad (2.4.5d)$$

Então, com (2.4.3) temos que:

$$\vec{r}_2 = \vec{r}_1 - \vec{R} = \overbrace{r_1 \sin \theta_1 \cos \phi_1}^{X_2} \hat{i} + \overbrace{r_1 \sin \theta_1 \sin \phi_1}^{Y_2} \hat{j} + \overbrace{(r_1 \cos \theta_1 - R)}^{Z_2} \hat{k} \quad (2.4.6)$$

Logo obtemos:

$$r_2 = \sqrt{X_2^2 + Y_2^2 + Z_2^2} = \sqrt{R^2 - 2r_1 \cos \theta_1 + r_1^2} \quad (2.4.7a)$$

$$\phi_2 = \phi_1 \quad (2.4.7b)$$

$$\theta_2 = \arccos \left(\frac{r_1 \cos \theta_1 - R}{r_2} \right) \quad (2.4.7c)$$

Levando em conta que $d\vec{r}_1 = r_1^2 \sin \theta_1 d\phi_1 d\theta_1 dr_1$, obtemos finalmente:

$$V(\vec{R}, \alpha_1, \alpha_2) = V_0 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \rho_1(\vec{r}_1, \alpha_1) \rho_2(r_2, \phi_2, \theta_2, \alpha_2) r_1^2 \sin \theta_1 d\phi_1 d\theta_1 dr_1 \quad (2.4.8)$$

Em que r_2 , ϕ_2 e θ_2 são obtidos das equações (2.4.7a), (2.4.7b) e (2.4.7c). Essa integral pode ser resolvida numericamente, de forma relativamente rápida, sem precisar de aproximações, obtendo assim um resultado exato.

Capítulo 3

Resultados obtidos e análises

Neste capítulo, vamos obter potenciais deformados através de diferentes aproximações e comparar os respectivos resultados com aqueles provenientes de cálculos exatos. Para realizar esses cálculos foram usados quatro núcleos: ^{28}Si , ^{154}Sm , ^{60}Ni e ^{208}Pb . A escolha foi feita levando em conta os altos valores de deformação e/ou amplitude de vibração desses núcleos.

A Tabela 3.1 apresenta valores médios de deformação ($\bar{\beta}_\lambda$) e amplitudes de vibração (b_λ) para as deformações de quadrupolo ($\lambda = 2$) e octupolo ($\lambda = 3$) de acordo com o GRVM [CC10] para alguns núcleos. Para efeito do cálculo de potenciais, assumimos valores “típicos” para os parâmetros de deformação, obtidos segundo a expressão $\beta_\lambda = \sqrt{\bar{\beta}_\lambda^2 + b_\lambda^2}$, conforme também apresenta a Tabela 3.1.

Núcleo	$\bar{\beta}_2$	γ_o	b_2	$\bar{\beta}_3$	b_3	β_2	γ	β_3
^{28}Si	0.49	$\frac{\pi}{3}$	0.15	0	0.24	0.51	$\frac{\pi}{3}$	0.24
^{60}Ni	0	0	0.10	0	0.13	0.10	0	0.13
^{154}Sm	0.33	0	0.056	0.076	0.032	0.33	0	0.082
^{208}Pb	0	0	0.027	0	0.069	0.027	0	0.069

Tabela 3.1: Valores médios de deformação ($\bar{\beta}_\lambda$) e amplitudes de vibração (b_λ) para as deformações de quadrupolo ($\lambda = 2$) e octupolo ($\lambda = 3$) da sistemática feita em [CC10]. A tabela também apresenta os valores dos parâmetros que foram utilizados nos cálculos de potenciais (β_2 , γ e β_3 .)

Antes de apresentar os cálculos de potenciais, vamos mostrar como nosso modelo descreve as densidades nucleares, já que foi através da expansão dessas densidades que calculamos os potenciais aproximados. As linhas pretas cheias das Figuras 3.0.1 e 3.0.2 representam as densidades de matéria para o ^{28}Si e ^{154}Sm , respectivamente, calculadas de maneira exata segundo as equações (1.4.2) e (1.4.9). Nessas figuras, as densidades são apresentadas como função da distância à origem no sistema de coordenadas intrínseco (portanto, todos os ângulos de Euler são nulos) para diversas orientações espaciais (θ, ϕ) . As linhas vermelhas pontilhadas nas figuras representam igualmente as densidades de matéria, mas agora calculadas de maneira aproximada através da expansão (1.4.22). Para a maioria das configurações apresentadas nessas figuras, a expansão (1.4.22) resulta em uma descrição bastante razoável da densidade. Como veremos, essa precisão no cálculo de densidades é suficiente para produzir resultados bastante acurados no cálculo de potenciais.

Figura 3.0.1: Densidade de matéria para o ^{28}Si para diferentes orientações espaciais no sistema de referência intrínseco. As linhas cheias representam o cálculo exato da densidade e as linhas pontilhadas o cálculo aproximado através da expansão (1.4.22).

Figura 3.0.2: O mesmo que a Figura 3.0.1, mas para o ^{154}Sm .

3.1 Resultados exatos para os potenciais

Inicialmente, vamos considerar três distintas configurações de ângulos de Euler para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. Nessas configurações, todos os ângulos de Euler correspondentes à $\theta_1^{(\lambda)}$ e $\theta_3^{(\lambda)}$ são nulos, enquanto $\theta_2^{(\lambda)}$ assume os valores abaixo:

$$\text{Configuração 1: } \begin{cases} \text{núcleo 1 } (^{28}\text{Si}) : \theta_2^{(2)} = \theta_2^{(3)} = 0 \\ \text{núcleo 2 } (^{154}\text{Sm}) : \theta_2^{(2)} = \theta_2^{(3)} = \pi \end{cases} \quad (3.1.1a)$$

$$\text{Configuração 2: } \begin{cases} \text{núcleo 1 : } \theta_2^{(2)} = \theta_2^{(3)} = \frac{\pi}{2} \\ \text{núcleo 2 : } \theta_2^{(2)} = \theta_2^{(3)} = \frac{\pi}{2} \end{cases} \quad (3.1.1b)$$

$$\text{Configuração 3: } \begin{cases} \text{núcleo 1 : } \theta_2^{(2)} = \theta_2^{(3)} = \pi \\ \text{núcleo 2 : } \theta_2^{(2)} = \theta_2^{(3)} = 0 \end{cases} \quad (3.1.1c)$$

A Figura 3.1.1 apresenta esquemas dessas configurações.

Figura 3.1.1: Formas dos núcleos deformados para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$, nas três configurações 3.1.1a, 3.1.1b e 3.1.1c. À esquerda mostram-se os núcleos projetados no plano- xz e à direita projetados no plano- yz .

Calculamos numericamente potenciais deformados para essas três configurações através das equações (2.2.11) e (2.2.16), as quais não envolvem nenhuma aproximação. Apesar de termos realizado a somatória da equação (2.2.16) apenas até $\lambda_{\text{max}} = 12$ (valores maiores fazem que os coeficientes de Clebsch-Gordan sejam zero), denominamos esse tipo de cálculo como sendo “exato”. No caso do potencial nuclear, também calculamos o potencial deformado através da integral tripla (2.4.8) e os respectivos resultados são praticamente idênticos àqueles obtidos com (2.2.11) e (2.2.16). Na Figura 3.1.2 (esquerda) apresentamos resultados exatos para as correções dos potenciais coulombiano e nuclear, V_{cor} , conforme definido em (2.0.2). No lado direito dessa mesma figura, apresentamos o potencial efetivo, $V_C + V_N$, tanto para as três configurações deformadas quanto no caso esférico (ND). Fica claro que diferentes configurações dos ângulos de Euler produzem potenciais deformados bastante diferentes e afetam significativamente as respectivas barreiras de potencial (que situam-se em uma região de distâncias de interação entre 9 e 14 fm).

Figura 3.1.2: Correções dos potenciais coulombiano e nuclear (esquerda) e potencial efetivo $V_C + V_N$ (direita), calculados de maneira exata para as três configurações angulares do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. O potencial efetivo não deformado (*ND*) também é apresentado na figura.

3.2 Resultados obtidos com nossas diferentes aproximações

Nesta seção, vamos comparar resultados obtidos para os potenciais através de diferentes aproximações. Iremos estudar as contribuições de ordem um e dois das deformações, bem como o efeito de assumirmos (ou não) um valor finito para a difusividade da densidade. Para o potencial coulombiano, consideramos quatro tipos de aproximações: expansão em primeira ou segunda ordem nas deformações, sendo que em cada um desses dois casos foi considerado valor da difusividade nulo (2.3.11) ou finito (2.3.16). Para o potencial nuclear, assumimos apenas difusividade finita (em primeira ou segunda ordem).

A Figura 3.2.1 (esquerda) mostra os V_{cor} coulombiano e nuclear no caso da Configuração 1 para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. O lado direito da figura apresenta uma ampliação dos resultados na região da barreira, que no caso nuclear foi adotada uma escala logarítmica do módulo do potencial. Os resultados exatos para V_{cor} também são mostrados na figura para efeito de

comparação. Claramente, os resultados obtidos com a expansão em segunda ordem são bem melhores do que os de primeira ordem. Além disso, no caso do potencial coulombiano, verifica-se um efeito significativo relacionado à difusividade da densidade.

Figura 3.2.1: Correções dos potenciais coulombiano e nuclear obtidas com diversas aproximações (nossas) para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$ na Configuração 1 dos ângulos de Euler. Foram consideradas contribuições em primeira e segunda ordem nas deformações e, no caso coulombiano, foi também estudado o efeito de um valor finito para a difusividade das densidades. Para efeito de comparação, a figura inclui resultados de cálculos exatos. O lado direito da figura corresponde a uma ampliação na região da barreira, que no caso nuclear foi adotada uma escala logarítmica do módulo do potencial. A flecha indica a posição do raio da barreira do potencial efetivo.

Na Figura 3.2.2, vemos, à direita, o V_{cor} coulombiano para a região de grandes distâncias de interação. Observa-se que o cálculo em segunda ordem com difusividade não nula praticamente reproduz o cálculo exato do potencial. À esquerda nessa mesma figura, apresentamos a soma dos potenciais nuclear e coulombiano deformados na região em torno da barreira, sendo que foi mantida coerência nessa soma no que se refere à ordem de deformação, ou seja, o potencial nuclear em primeira ordem foi somado com o potencial coulombiano em primeira

ordem e assim por diante. Além disso, considerou-se (apenas para o potencial coulombiano) os resultados obtidos com $a = 0$ ou com valor finito de difusividade ($a \neq 0$). Observa-se, na figura, que novamente o cálculo em segunda ordem é muito melhor. Porém, surpreendentemente, dentre as aproximações de segunda ordem, o caso com $a = 0$ fornece valores ligeiramente mais próximos dos exatos para as barreiras (lado esquerdo da figura). O que realmente ocorre é que o maior erro no V_{cor} coulombiano para $a = 0$ compensa o erro do V_{cor} nuclear (vide Figura 3.2.1) o que gera, no final das contas, um cancelamento de erros e resulta num valor mais acurado para a soma desses potenciais.

Figura 3.2.2: Direita - Correção do potencial coulombiano, obtido para diversas aproximações (nossas) e também através de cálculo exato, para grandes distâncias de interação, no caso da Configuração 1 do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. Esquerda - Soma dos potenciais coulombiano e nuclear deformados mostrando as barreiras de potencial.

Cálculos semelhantes também foram realizados para as Configurações 2 e 3 do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. Os correspondentes resultados são apresentados nas Figuras 3.2.3 e 3.2.4 (Configuração 2) e 3.2.5 e 3.2.6 (Configuração 3). Resultados similares aos obtidos para a Configuração 1 são também observados para as demais configurações. Em particular, como seria de esperar, os resultados de cálculos em segunda ordem são consistentemente melhores do que os obtidos em ordem um. No caso do potencial coulombiano, para regiões internas o cálculo com difusividade não nula é sempre muito melhor do que com $a = 0$ (dentro da mesma ordem de aproximação), mas o mesmo nem sempre ocorre para grandes distâncias de interação.

Figura 3.2.3: O mesmo da Figura 3.2.1, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler.

Figura 3.2.4: O mesmo da Figura 3.2.2, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler.

Figura 3.2.5: O mesmo da Figura 3.2.1, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler.

Figura 3.2.6: O mesmo da Figura 3.2.2, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler.

3.3 Comparação dos resultados do modelo GRVM com outras aproximações feitas usualmente

De maneira geral, podemos afirmar que os melhores resultados obtidos através das nossas aproximações são aqueles relacionados com cálculos em segunda ordem nas deformações e com valor de difusividade finita. Daqui para a frente, vamos denominar esse tipo de aproximação como GRVM. Como vimos na seção 2.1, existem alguns outros modelos usualmente utilizados para o cálculo de potenciais deformados. Na presente seção, iremos comparar os resultados desses modelos com os obtidos dentro do contexto do GRVM.

As Figuras 3.3.1, 3.3.3 e 3.3.5 mostram as correções dos potenciais coulombiano e nuclear nos casos das configuração 1, 2 e 3 para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. Além dos resultados dos cálculos exato e GRVM, as figuras também apresentam valores obtidos com os modelos usuais, em que o potencial nuclear pode ser calculado em primeira ou segunda ordem. Já as Figuras 3.3.2, 3.3.4 e 3.3.6 mostram, para as três configurações, a correção do potencial coulombiano para grandes distâncias de interação (lado direito das figuras) e a soma dos potenciais coulombiano e nuclear deformados (lado esquerdo das figuras). Pode-se ver que para os potenciais corrigidos, V_{cor} , tanto nuclear quanto coulombiano, a aproximação GRVM descreve melhor o potencial exato do que as outras aproximações para as três configurações. Na região da barreira de potencial os resultados do GRVM continuam sendo bastante satisfatórios e notavelmente melhores que as aproximações usuais a primeira ordem.

Figura 3.3.1: Correções dos potenciais coulombiano e nuclear obtidas com diversas aproximações (GRVM e usuais) para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$ na Configuração 1 dos ângulos de Euler. Foram consideradas aproximações usuais para o potencial coulombiano (2.1.8) e para o nuclear (2.1.6) em primeira e segunda ordem; assim como a aproximação GRVM deste trabalho. Para efeito de comparação, a figura inclui resultados de cálculos exatos. A flecha no lado direito da figura indica a posição do raio da barreira do potencial efetivo.

Figura 3.3.2: Direita - Correção do potencial coulombiano, obtido para diversas aproximações (GRVM e usuais) e também através do cálculo exato, para grandes distâncias de interação, no caso da Configuração 1 do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$. Esquerda - Soma dos potenciais coulombiano e nuclear deformados mostrando as barreiras de potencial.

Figura 3.3.3: O mesmo da Figura 3.3.1, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler.

Figura 3.3.4: O mesmo da Figura 3.3.2, mas para a Configuração 2 de ângulos de Euler.

Figura 3.3.5: O mesmo da Figura 3.3.1, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler.

Figura 3.3.6: O mesmo da Figura 3.3.2, mas para a Configuração 3 de ângulos de Euler.

Também realizamos cálculos para os sistemas $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$ e $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$, apenas para a Configuração 1 dos ângulos de Euler. Os correspondentes resultados encontram-se nas Figuras 3.3.7 até 3.3.10. Para o sistema mais pesado dos aqui considerados, $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$, podemos observar um ajuste excepcional com o cálculo exato, e com melhores resultados que as outras aproximações. Da mesma maneira, notamos que para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$, o mais leve dos sistemas considerados, o ajuste do GRVM é um pouco menos preciso na região interna do que nos casos de sistemas mais pesados.

Figura 3.3.7: O mesmo da Figura 3.3.1, mas para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$.

Figura 3.3.8: O mesmo da Figura 3.3.2, mas para o sistema $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$.

Figura 3.3.9: O mesmo da Figura 3.3.1, mas para o sistema $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$.

Figura 3.3.10: O mesmo da Figura 3.3.2, mas para o sistema $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$.

3.4 Conservação de volume e posição do centro de massa

Conforme discutido na seção 1.4.2, o modelo GRVM leva em consideração o valor finito da difusividade no cálculo de α_{00} e $\alpha_{1\mu}$ através das equações (1.4.15), (1.4.16) e (1.4.17), respectivamente. Essas equações foram obtidas visando manter a conservação de volume para núcleos deformados, e também para manter o centro de massa dos núcleos na origem do sistema de coordenadas intrínseco. Para verificar a precisão com que essas características são obtidas, na Tabela 3.2 apresentamos as coordenadas dos centros de massa dos núcleos (para as distribuições de matéria), bem como a diferença relativa percentual entre os valores de ρ_0 obtidos com as expressões (1.4.8) e (1.4.9). Esses resultados correspondem às Configurações 1, 2 e 3 no caso do sistema $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$, e à Configuração 1 para $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$ e $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$.

Sistema	Config.	Núcleo 1				Núcleo 2			
		$X_{c.m.}$	$Y_{c.m.}$	$Z_{c.m.}$	$\frac{\Delta\rho_0}{\rho_0}(\%)$	$X_{c.m.}$	$Y_{c.m.}$	$Z_{c.m.}$	$\frac{\Delta\rho_0}{\rho_0}(\%)$
$^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$	1	0	0	-0.0013	0.11	0	0	0.0068	0.06
	2	0.0013	0	0	0.11	0.0068	0	0	0.06
	3	0	0	0.0013	-0.11	0	0	-0.0068	0.06
$^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$	1	0	0	-0.0087	-0.11	0	0	0.0087	-0.11
$^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$	1	0	0	0	0.01	0	0	-0.0001	0.01

Tabela 3.2: Coordenadas do centro de massa (em fm) para as distribuições de matéria dos núcleos nos sistemas $^{28}\text{Si} + ^{154}\text{Sm}$, $^{28}\text{Si} + ^{28}\text{Si}$ e $^{60}\text{Ni} + ^{208}\text{Pb}$ nas configurações de ângulos de Euler indicadas. Apresenta-se, também, os valores da diferença relativa percentual entre os valores de ρ_0 obtidos com as expressões (1.4.8) e (1.4.9).

Pode-se ver que o deslocamento do centro de massa, é extremamente pequeno para os três sistemas. Já a conservação de volume é obtida dentro de uma precisão da ordem de 0.1%. Vale mencionar, aqui, que os núcleos ^{28}Si e ^{154}Sm estão entre os mais deformados da tabela de núclídeos estáveis.

Conclusões e perspectivas

Como comentado ao longo deste trabalho, aproximações em cálculos de potenciais deformados são geralmente necessárias para evitar cálculos numéricos de integrais multidimensionais, que são inviáveis de serem realizados com o poder de computação atual. Por outro lado, tais aproximações não deveriam envolver perda significativa de acurácia. A motivação do presente trabalho foi desenvolver um método preciso de cálculo de potenciais deformados entre íons pesados. O método apresentado aqui é uma generalização do que já havia sido anteriormente publicado, dentro do contexto do modelo generalizado de rotação-vibração.

Nossos resultados mostram claramente que, para sistemas bastante deformados, é crucial considerarmos a expansão das densidades até segunda ordem nas deformações. Além disso, a utilização de um valor finito para a difusividade é importante para fornecer valores mais realísticos para o potencial coulombiano em pequenas distâncias de interação. Em nosso trabalho, não ficou totalmente claro a importância da difusividade (no caso coulombiano) para grandes distâncias de interação. Entretanto, para o modelo GRVM, em [CC10] mostra-se claramente que o valor da difusividade é bastante importante para a correta determinação da probabilidade de transição $B(E\lambda)$.

Então, definimos como aproximação GRVM aquela envolvendo a expansão das densidades até segunda ordem com difusividade finita. Os resultados dessa aproximação foram comparados com algumas outras aproximações usualmente adotadas em cálculos de canais acoplados. O conjunto total de nossas análises mostra que a aproximação GRVM é superior a essas outras de uma maneira geral, e em particular de forma muito superior na região de pequenas distâncias de interação. No que se refere a valores obtidos para seções de choque através de cálculos de canais acoplados, é possível que essa região interna seja importante

para altas energias de bombardeio (que envolve grandes valores de momento angular). Por outro lado, talvez o canal de fusão em energias extremamente sub-coulombianas seja um pouco sensível à essa região interna através do processo de tunelamento de barreiras.

A aproximação GRVM é obtida através de duas expressões analíticas (2.2.12) e (2.3.16), sendo que essas expressões exprimem a dependência do potencial com as deformações de maneira explícita. Essa característica é extremamente útil para a obtenção de potenciais de acoplamento de maneira analítica. Sendo assim, a aproximação GRVM deverá ser muito útil para o desenvolvimento de um código computacional de canais acoplados, o qual tratará os acoplamentos inelásticos de forma mais geral e acurada do que vem se fazendo na literatura até o momento.

Apêndice A

Cálculos numéricos

Nesta parte da dissertação serão apresentados e comentados alguns fatos importantes para o desenvolvimento do trabalho, principalmente relacionados com a precisão e o tempo de CPU dos cálculos computacionais que foram feitos. A nossa atenção estará focada no cálculo numérico das equações (2.2.11), (2.2.16), (2.3.11) e (2.3.16); as quais são necessárias para obter os potenciais de maneira exata e aproximada. Dado que as somatórias e integrais -no cálculo exato- deveriam ser feitas com infinitos termos e que isso na prática é impossível, já que tomaria um tempo infinito, a ideia é ter um equilíbrio entre precisão numérica e tempo de CPU. O valor que será obtido no cálculo de (2.2.11) vai ser usado como a nossa referência e tomado como “exato”, mesmo assumindo $\lambda_{\max} = 12$ (valores maiores fazem que os coeficientes de Clebsch-Gordan sejam zero) na equação (2.2.16) no cálculo do potenciais.

A.1 Aspectos numéricos e computacionais dos cálculos

Para calcular os potenciais nuclear e coulombiano de maneira exata, devemos calcular antes a integral (2.2.11), que repetimos aqui:

$$M_{\lambda\mu}(k) = \int \rho(\vec{r}) j_{\lambda}(kr) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) d\vec{r} \quad (\text{A.1.1})$$

onde $d\vec{r} = r^2 \sin\theta d\theta d\phi$, $j_\lambda(kr)$ são as funções esféricas de Bessel e $Y_{\lambda\mu}(\Omega_r)$ são os harmônicos esféricos. A densidade $\rho(\vec{r})$ é dada pela equação (1.4.2),

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\rho_0}{1 + \exp\left(\frac{r-R(\Omega)}{a}\right)} \quad (\text{A.1.2})$$

onde a é a difusividade, que vem dada pela equação (1.4.3), e $R(\Omega)$ é o raio do núcleo deformado, que vem dado pela equação (1.4.10),

$$R(\Omega) = R_0 \left[1 + \sum_{\lambda=0}^3 \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} \alpha_{\lambda\mu}^* Y_{\lambda\mu}(\Omega) \right] \quad (\text{A.1.3})$$

Daqui para frente, indicarmos as contas com Z (número de carga) e considerando o raio de carga e a densidade de carga no cálculo do potencial coulombiano, mas as contas podem ser feitas analogamente para o cálculo do potencial nuclear trocando Z por A (número de massa) e o raio e densidade de carga pelo raio e densidade de matéria.

No cálculo exato, o valor de ρ_0 é obtido da equação (1.4.8). No cálculo aproximado, esse valor é obtido da equação (1.4.9), reproduzida abaixo:

$$\rho_0 = \frac{Z}{4\pi \int_0^\infty \frac{r^2}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)} dr} \quad (\text{A.1.4})$$

Consideremos a integral no denominador:

$$\int_0^\infty \frac{r^2}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)} dr \quad (\text{A.1.5})$$

Essa integral não tem solução analítica e, portanto, temos que achar uma forma para obter esse valor o mais acuradamente possível de forma numérica, dentro do equilíbrio tempo-precisão. Então, vamos assumir que para $r \gg R_0$ temos:

$$1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right) \approx \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right) \quad (\text{A.1.6})$$

e daqui podemos escrever,

$$\int_0^\infty \frac{r^2}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)} dr \simeq \underbrace{\int_0^{R_{max}} \frac{r^2}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)} dr}_{\text{computacional}} + \underbrace{\int_{R_{max}}^\infty \frac{r^2}{\exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)} dr}_{\text{analítica}} \quad (\text{A.1.7})$$

onde R_{max} vai ser dado por

$$R_{max} = R_0 + 8a \quad (\text{A.1.8})$$

O valor de R_{max} foi escolhido sob considerações de tempo computacional e precisão no cálculo numérico. Esse valor cumpre a condição para (A.1.6) dentro de aproximadamente 0.03% de precisão.

A primeira integral do lado direito da equação (A.1.7) pode ser calculada rapidamente de maneira numérica, onde foi escolhido um passo de integração $dr = 0.02 \text{ fm}$. A segunda integral pode ser calculada analiticamente, obtendo finalmente:

$$\rho_0 = \frac{Z}{4\pi \left[\int_0^{R_{max}} \frac{r^2}{1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right)} dr + a \exp\left(\frac{R_0-R_{max}}{a}\right)(2a^2 + 2aR_{max} + R_{max}^2) \right]} \quad (\text{A.1.9})$$

Por outro lado, no decorrer deste trabalho e através de testes feitos, conseguimos perceber que o termo $M_{00}(k)$ tinha bastante peso no cálculo do valor da correção do potencial. Por causa disso, decidimos calcular esse termo da maneira mais acurada possível, dentro dos critérios de tempo e precisão. Neste ponto podemos olhar primeiramente o termo M_{00} calculado com a equação (2.3.16):

$$\begin{aligned} M_{00}(k) = & \sqrt{4\pi} \hat{\rho}(k) + \alpha_{00} \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} dr \\ & + \frac{1}{2} \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} dr \sum_{l_a=2}^3 \sum_{m_a=-l_a}^{l_a} \sum_{l_b=2}^3 \sum_{m_b=-l_b}^{l_b} \alpha_{l_a m_a}^* \alpha_{l_b m_b}^* \begin{bmatrix} l_a & l_b & 0 \\ m_a & m_b & 0 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (\text{A.1.10})$$

com $\hat{\rho}(k)$ definido pela equação (2.3.15),

$$\hat{\rho}(k) = \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} dr \quad (\text{A.1.11})$$

Nesse caso, para obter $M_{00}(k)$, vamos ter três termos de nosso interesse:

$$\int_0^\infty r^2 j_0(kr) \rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} dr \quad (\text{A.1.12a})$$

$$\int_0^\infty r^2 j_0(kr) \frac{\partial \rho}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} dr \quad (\text{A.1.12b})$$

$$\int_0^\infty r^2 j_0(kr) \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} dr \quad (\text{A.1.12c})$$

com $\rho(r, \eta)|_{\eta=0}$, $\frac{\partial \rho}{\partial \eta}|_{\eta=0}$ e $\frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2}|_{\eta=0}$ dados pelas equações (1.4.24a), (1.4.24b) e (1.4.24c) respectivamente. Substituindo as equações (1.4.24a)-(1.4.24c) em (A.1.12a)-(A.1.12c), obtemos as integrais:

$$\rho_0 \int_0^\infty r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{1}{1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})} dr \quad (\text{A.1.13a})$$

$$\frac{\rho_0 R_0}{a} \int_0^\infty r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{\exp(\frac{r-R_0}{a})}{\left[1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]^2} dr \quad (\text{A.1.13b})$$

$$-\frac{\rho_0 R_0^2}{a^2} \int_0^\infty r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{\exp(\frac{r-R_0}{a}) \left[1 - \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]}{\left[1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]^3} dr \quad (\text{A.1.13c})$$

Essas integrais também não têm uma solução analítica, e vamos usar novamente a aproximação (A.1.6), obtendo:

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \rho(r, \eta)|_{\eta=0} dr = & \rho_0 \left\{ \int_0^{R_{max}} r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{1}{1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})} dr + \frac{a \exp(\frac{R_0-R_{max}}{a})}{k (a^2 k^2 + 1)^2} \times \right. \\ & \left[(R_{max} + a + a^2 k^2 R_{max} - a^3 k^2) \sin(k R_{max}) \right. \\ & \left. \left. + a k^2 (a^2 k^2 + 1)^2 (R_{max} + 2a + a^2 k^2 R_{max}) \cos(k R_{max}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1.14})$$

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \frac{\partial \rho}{\partial \eta}|_{\eta=0} dr = & \frac{\rho_0 R_0}{a} \left\{ \int_0^{R_{max}} r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{\exp(\frac{r-R_0}{a})}{\left[1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})\right]^2} dr + \frac{a \exp(\frac{R_0-R_{max}}{a})}{k (a^2 k^2 + 1)^2} \times \right. \\ & \left[(R_{max} + a + a^2 k^2 R_{max} - a^3 k^2) \sin(k R_{max}) \right. \\ & \left. \left. + a k^2 (a^2 k^2 + 1)^2 (R_{max} + 2a + a^2 k^2 R_{max}) \cos(k R_{max}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1.15})$$

e finalmente

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \frac{\partial^2 \rho}{\partial \eta^2} \Big|_{\eta=0} dr = & -\frac{\rho_0 R_0^2}{a^2} \left\{ \int_0^{R_{max}} r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{\exp(\frac{r-R_0}{a}) [1 - \exp(\frac{r-R_0}{a})]}{[1 + \exp(\frac{r-R_0}{a})]^3} dr \right. \\ & - \frac{a \exp(\frac{R_0-R_{max}}{a})}{k (a^2 k^2 + 1)^2} \times \left[(R_{max} + a + a^2 k^2 R_{max} - a^3 k^2) \sin(k R_{max}) \right. \\ & \left. \left. + a k^2 (a^2 k^2 + 1)^2 (R_{max} + 2a + a^2 k^2 R_{max}) \cos(k R_{max}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1.16})$$

Com isso, fica completo o cálculo da integral (2.3.16).

Por outro lado, para obter o potencial exato podemos achar $M_{00}(k)$ através da equação (2.2.11):

$$M_{00}(k) = \frac{\rho_0}{\sqrt{4\pi}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left[\int_0^\infty r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{1}{1 + \exp(\frac{r-R(\theta,\phi)}{a})} dr \right] \sin \theta d\theta d\phi \quad (\text{A.1.17})$$

A parte radial dessa equação pode ser resolvida da mesma maneira que em (A.1.14), só que trocando R_0 pelo valor de $R(\theta, \phi)$. Escolhemos $R_{max} = R(\theta, \phi) + 8a$. Então,

$$\begin{aligned} \int_0^\infty r^2 j_0(kr) \rho(r, \eta) \Big|_{\eta=0} dr = & \rho_0 \left\{ \int_0^{R_{max}} r^2 \frac{\sin(kr)}{kr} \frac{1}{1 + \exp(\frac{r-R(\theta,\phi)}{a})} dr + \frac{a \exp(\frac{R(\theta,\phi)-R_{max}}{a})}{k (a^2 k^2 + 1)^2} \times \right. \\ & \left[(R_{max} + a + a^2 k^2 R_{max} - a^3 k^2) \sin(k R_{max}) \right. \\ & \left. \left. + a k^2 (a^2 k^2 + 1)^2 (R_{max} + 2a + a^2 k^2 R_{max}) \cos(k R_{max}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1.18})$$

Para a parte angular de (A.1.17), após ser feita a integral radial, fazemos o cálculo de forma totalmente numérica, com 90 passos de integração tanto em θ quanto em ϕ , valores para os quais essa integral numérica converge satisfatoriamente.

Após ter calculado os termos $M_{\lambda\mu}(k)$ nas equações (2.2.11), (2.3.11) e (2.3.16), podemos calcular finalmente o potencial através da equação (2.2.16), mostrada aqui de novo:

$$\begin{aligned} V(R, \alpha_1, \alpha_2) = & 8 \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda} \sum_{\mu_1} \left\{ i^{-\lambda-\lambda_2+\lambda_1} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \begin{bmatrix} \lambda & \lambda_2 & \lambda_1 \\ 0 & \mu_1 & \mu_1 \end{bmatrix} \right. \\ & \left. \times \int \tilde{v}(k) k^2 j_\lambda(kR) M_{\lambda_2 \mu_1}^*(k) M_{\lambda_1 \mu_1}(k) dk \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.1.19})$$

A integral em k foi feita numericamente com um passo de integração $dk = 0.02 \text{ fm}^{-1}$ e com $k_{\text{max}} = 10 \text{ fm}^{-1}$. Como já dito anteriormente, na somatória em λ de (2.2.16) e (A.1.19) utilizamos como máximo valor $\lambda_{\text{max}} = 12$, mesmo no cálculo exato. Porém, como comentado na seção 3.1, no caso nuclear os resultados de (2.2.16) com $\lambda_{\text{max}} = 12$ são praticamente idênticos nos obtidos com a equação (2.4.8) (que não envolve nenhuma aproximação).

Referências Bibliográficas

- [BJ95] W. E. Burcham and M. Jobes. *Nuclear and particle physics*. Longman, 1995.
- [BM69] A. Bohr and B. R. Mottelson. *Nuclear Structure: Nuclear deformations*. Nuclear Structure. W. A. Benjamin, 1969.
- [CC10] L. C. Chamon and B. V. Carlson. *Nuclear Physics A 846*, pages 1–30, 2010.
- [CCG⁺02] L. C. Chamon, B. V. Carlson, L. R. Gasques, D. Pereira, C. De Conti, M. A. G. Alvarez, M. S. Hussein, M. A. Cândido Ribeiro, E. S. Rossi Jr., and C. P. Silva. *Physical Review C 66*, page 014610, 2002.
- [CCG04] B. V. Carlson, L. C. Chamon, and L. R. Gasques. *Physical Review C 70*, pages 1–4, 2004.
- [CNC09] L. C. Chamon, G. P. A. Nobre, and B. V. Carlson. *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics 36*, page 025102, 2009.
- [CNP⁺04] L. C. Chamon, G. P. A. Nobre, D. Pereira, E. S. Rossi Jr., C. P. Silva, L. R. Gasques, and B. V. Carlson. *Physical Review C 70*, pages 1–8, 2004.
- [Edm96] A. R. Edmonds. *Angular Momentum in Quantum Mechanics*. Investigations in Physics Series. Princeton University Press, 1996.
- [EG70] J. M. Eisenberg and W. Greiner. *Nuclear models: collective and single-particle phenomena*. Number v. 1-2 in Nuclear Theory. North-Holland, 1970.
- [GMB97] W. Greiner, J.A. Maruhn, and D.A. Bromley. *Nuclear Models*. Springer London, Limited, 1997.

- [Lil01] J. S. Lilley. *Nuclear physics: principles and applications*. Manchester physics series. J. Wiley, 2001.
- [MHD⁺07] A. Mukherjee, D. Hinde, M. Dasgupta, K. Hagino, J. Newton, and R. Butt. *Physical Review C* 4, pages 1–7, 2007.
- [RS80] P. Ring and P. Schuck. *The nuclear many-body problem*. Springer-Verlag, 1980.
- [SL79] G. R. Satchler and W. G. Love. *Physics Reports* 55, pages 183–254, 1979.
- [Tho88] Ian J. Thompson. *Computer Physics Reports* 7, pages 167–212, 1988.
- [TRI00] Noboru Takigawa, Tamanna Rumin, and Naoki Ihara. *Physical Review C* 61, page 044607, 2000.
- [VJV87] H. De Vries, C. W. De Jager, and C. De Vries. *Atomic data and nuclear data tables* 36, pages 495–536, 1987.
- [Won08] S. S. M. Wong. *Introductory Nuclear Physics*. Physics textbook. Wiley, 2008.