

el

UNIVERSIDADE
DE
SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

"PROPRIEDADES ESTATÍSTICAS DO MODELO
DE CAMADAS NUCLEAR "

ORIENTADO: NILSON ANTUNES DE OLIVEIRA

ORIENTADOR: PROF. DR. HÉLIO DIAS



DISSERTAÇÃO DE MESTRADO
APRESENTADA NO
INSTITUTO DE FÍSICA DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Deferido em 24/6/88

SÃO PAULO

SBI-IFUSP

1988



305M810T1379

539.7

048p

M

e.1

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Oliveira, Nilson Antunes de
Propriedades estatísticas do modelo de
camadas nuclear. São Paulo, 1988.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de
São Paulo. Instituto de Física. Departamento
de Física Experimental.

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

Unitermos: 1. Modelo de camadas; 2. Matri
zes randômicas; 3. Flutuação no espectro nu-
clear.

USP/IF/SBI - 23/88

" o Homem é um fim em si mesmo. Quando não se encontra e não se percebe como tal, angústia-se, sofre. Sobrevém o tédio, a angustia, o caminhar para o nada"

AGRADECIMENTOS

- Ao Prof Hélio dias pelo dedicado trabalho de orientação
- A Regina D. Pacheco com quem tive o prazer de conviver estes últimos anos.
- A meus pais e meus irmãos pelo carinho
- A Carlos R.F. de Castro pela "força" que sempre me deu
- As secretárias Olga, Lourdes, Rita e Cláudia pelos serviços prestados
- Ao pessoal de apoio do VAX do IFUSP pela assessoria
- A Carlos R. Marques e João Carlos pelos desenhos
- Aos colegas do IFUSP pela convivência diária.

RESUMO

Neste trabalho nós analisamos o comportamento estatístico dos autovalores e autovetores do Hamiltoniano nuclear do modelo de camadas no espaço completo $d_{5/2}$ $s_{1/2}$ $d_{3/2}$ para vários núcleos da camada sd.

ABSTRACT

In this work we analysed the statistical behaviour of the eigenvalues and eigenvectors of the nuclear shell model Hamiltonian in the full $d_{5/2}$ $s_{1/2}$ $d_{3/2}$ model space for several sd-shell nuclei

ÍNDICE

	Pag
CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II - TÉCNICA DE MODELO DE CAMADAS	
II-1 INTRODUÇÃO	4
II-2 COEFICIENTES DE FRACTIONAL PARENTAGE.....	10
II-3 INFORMAÇÕES DE CAMADA ÚNICA.....	12
II-4 CÁLCULO EM UMA MULTICAMADA.....	15
II-5 INTERAÇÃO RESIDUAL.....	19
II-6 CÓDIGO COMPUTACIONAL DO MODELO DE CAMADAS...	30
CAPÍTULO III - TEORIA ESTATÍSTICA DO ESPECTRO NUCLEAR	
III-1 INTRODUÇÃO.....	34
III-2 CONJUNTO DE MATRIZES RANDÔMICAS.....	37
III-3 CONJUNTO GAUSSIANO ORTOGONAL	41
III-3.1 DISTRIBUIÇÃO DOS ESPAÇAMENTOS DE NIVEIS.....	43
III-3.2 DISTRIBUIÇÃO DAS AMPLITUDES DAS AUTOFUNÇÕES.....	46
CAPÍTULO IV- RESULTADOS E DISCUSSÕES	
IV-1 INTRODUÇÃO.....	51
IV-2 MÉTODO DE ANÁLISE.....	52
IV-3 DISCUSSÕES.....	53
CAPÍTULO V CONCLUSÕES.....	78
REFERÊNCIAS.....	80

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Os modelos nucleares têm sido nos últimos anos uma ferramenta de grande valia para a interpretação das informações experimentais conhecidas do núcleo. Entre esses modelos, o modelo de camadas, é talvez o que tenha sido utilizado com mais sucesso na descrição de propriedades tais como, energias, funções de onda e propriedades eletromagnéticas do núcleo. Esse modelo entretanto torna-se inoperante em regiões de alta energia de excitação onde a densidade de estados é extremamente elevada tornando impraticável a descrição dos estados em termos individuais.

O objetivo dos modelos nucleares nas regiões de altas energias de excitação se restringe a descrever propriedades médias tais como densidades de níveis e estados especiais tais como a ressonância gigante que possui uma estrutura peculiar. Para o restante dos estados, o que é possível é fornecer uma descrição estatística dos níveis de energia que por outro lado não explicam uma sequência detalhada de níveis de cada núcleo mas descrevem o grau de irregularidade que uma sequência de níveis deve apresentar num determinado núcleo.

Esse grau de irregularidade (caoticidade) ou regularidade do núcleo atômico é uma das questões de grande

interesse no momento. A teoria das matrizes randômicas que foi iniciada por Wigner e completamente desenvolvida por Dyson, Metha e outros⁽¹⁻³⁾ é a ferramenta apropriada para analisar o grau de caoticidade do núcleo.

Uma vez que a descrição microscópica básica da estrutura nuclear é o modelo de camadas, é extremamente relevante investigar suas propriedades estatísticas. Em outras palavras até que ponto o Hamiltoniano do modelo de camadas pode ser representado por um conjunto randômico. Uma resposta afirmativa para essa questão seria duplamente importante. Primeiramente porque forneceria um importante exemplo de caos quântico em sistemas finitos. Em segundo lugar poderia simplificar a descrição de vários observáveis nucleares. Em particular poderia simplificar o cálculo das larguras de ressonâncias gigantes⁽⁴⁾.

Brown e Bertsch(BB)⁽⁵⁾ recentemente investigaram em que grau os resultados com o modelo de camadas em altas energias de excitação são consistentes com as hipóteses estatísticas. Eles encontraram que para os estados na região (15-30MeV) de alta densidade de níveis apresentam o comportamento da distribuição de Porter-Thomas (PT)⁽¹⁻³⁾. O critério que eles usaram para caracterizar a estatisticalidade das autofunções foi baseado na quantidade

$$\lambda = \frac{\langle H \rangle_{OFF}}{D}$$

com $\langle H \rangle_{OFF}$ representando o desvio médio quadrático dos elementos de matriz fora da diagonal e D o espaçamento médio entre os níveis. Eles postularam que quando $\lambda > 1$, os

autovalores individuais se desacoplariam da parte diagonal do Hamiltoniano e a distribuição das amplitudes das autofunções se aproximaria da PT.

No presente trabalho nós estendemos o estudo de BB para núcleos com mais partículas de valência e correspondentemente maiores dimensões. Para tais casos os resultados do modelo de camadas conduz a uma descrição mais completa nos primeiros 10 MeV de energia de excitação.

A técnica de modelo de camadas utilizada para gerar os estados nucleares, baseia-se no acoplamento sucessivo de camada única para formar a multicamada final. O cálculo dos elementos de matriz do operador Hamiltoniano entre estados de base de uma multicamada é feito a partir do conhecimento dos elementos de matriz elementares. Todo o formalismo é desenvolvido utilizando o método da segunda quantização e a álgebra de Racah. Esta técnica está descrita no capítulo II.

No capítulo III é apresentado um pequeno resumo sobre a teoria das matrizes randômicas, com uma ênfase para o comportamento dos autovalores e autovetores de uma matriz pertencente ao conjunto Gaussiano ortogonal (GOE).

No capítulo IV são apresentados e discutidos os resultados do estudo realizado sobre o comportamento dos autovalores e amplitudes dos autovetores gerados com base no modelo de camadas descrito no capítulo II. No capítulo V são apresentadas as conclusões sobre este trabalho.

CAPÍTULO II

TÉCNICA DE MODELO DE CAMADAS

II-1 INTRODUÇÃO

No estudo e descrição do núcleo atômico, três são as hipóteses usualmente utilizadas:

- 1 - O núcleo consiste de protons e neutrons que são considerados partículas pontuais
- 2 - A dinâmica dos nucleons é descrita pela equação de Schroedinger não relativística
- 3 - A interação entre os nucleons pode ser descrita por potenciais de dois corpos.

Baseados nestas hipóteses, a física de um sistema de n nucleons será descrita pela equação:

$$\left(\sum T_i + \sum V_{ij} \right) |\Psi_k\rangle = E_k |\Psi_k\rangle \quad (2.1)$$

onde T_i é a energia cinética da i -ésima partícula, V_{ij} é o potencial de dois corpos entre a i -ésima partícula e a j -ésima partícula. E_k e $|\Psi_k\rangle$ representam a energia e função de onda do k -ésimo estado excitado do sistema.

A resolução da equação (2.1) para o sistema nuclear, apresenta entretanto duas dificuldades. Primeiro porque é um problema de muitos corpos e como é bem conhecido não apresenta solução exata, sendo necessário a utilização de métodos aproximados. Segundo porque a natureza exata da interação nucleon-nucleon não é conhecida. Para transpor estas dificuldades, vários modelos foram formulados nos últimos anos baseados em conceitos físicos simples, permitindo a interpretação sistemática das informações experimentais

Podemos classificar os modelos nucleares grosseiramente em dois grupos:

1 - Modelos Coletivos (ou Macroscópicos): Estes modelos descrevem certos estados do núcleo em termos de parâmetros coletivos relacionados com o núcleo como um todo, não tendo nenhuma conexão direta com as propriedades individuais do nucleon. Um exemplo é o modelo vibracional que descreve o núcleo como uma gota líquida utilizando a massa coletiva e a tensão superficial do núcleo como parâmetros

2 - Modelos Microscópicos : Os modelos microscópicos explicam as propriedades dos núcleos através da interação entre os nucleons. Um exemplo é o modelo de camadas (Shell-Model).

O modelo de camadas nuclear teve sua origem no modelo de camadas atômico introduzido por N.Bohr que explicava os números mágicos no átomo. Para os eletrons, a interação

relevante é dada pela força Coulombiana, onde o núcleo é o centro que fixa o campo Coulombiano no qual os eletrons movem-se independentemente em uma primeira aproximação. O potencial esférico Coulombiano é dado por $V = Ze^2/r$ onde Z é o número atômico, " e " é a carga do eletron e " r " é a distância entre o eletron e o núcleo.

As órbitas dos eletrons caracterizadas por diversos números quanticos são obtidas através da resolução da equação de Schroedinger para o potencial Coulombiano. Na obtenção das órbitas eletrônicas, complicações adicionais aparecem porque os eletrons que se movem na periferia do átomo não estão sujeitos à toda força Coulombiana. isto ocorre devido a presença de outros eletrons no interior, este fato é conhecido como efeito de blindagem.

Uma aproximação similar ao modelo de camadas atômico, tem sido muito util para a descrição dos núcleos. Existem entretanto, algumas diferenças essenciais em relação ao caso atômico.

- 1- Além de ser atrativa, a interação nucleon-nucleon, é completamente diferente da interação Coulombiana e contém um termo de spin-órbita
- 2- Existem dois tipos de nucleon (proton e neutron) dando origem a um número quântico adicional, o isospin(T)
- 3- No sistema nuclear, não existe o centro de forças, similar aquele do átomo

Por estas razões, o número máximo de partículas nas camadas diferem para núcleos e átomos, desta forma, as camadas fechadas ocorrem com diferentes números de partículas para os dois sistemas.

Os níveis de energia do sistema nuclear mostra uma estrutura de camadas semelhante ao caso atômico que em virtude do princípio de exclusão de Pauli, cada estado ou órbita com um momento angular bem definido, pode somente ser ocupado por um número limitado de fermions idênticos. Cada órbita é caracterizada por um número quântico radial, momento angular orbital, momento angular total, denotados por n, l e j respectivamente.

O princípio básico do modelo de camadas nuclear é considerar que em primeira aproximação, cada nucleon (proton ou neutron) move-se independentemente em um potencial criado pela interação de todos os nucleons (potencial médio). Com esta aproximação, o sistema de partículas interagentes é tratado como um sistema de partículas independentes movendo-se em um poço de potencial médio.

Antes de 1945, o progresso no desenvolvimento do modelo de camadas nuclear foi muito lento, principalmente porque o modelo não conseguia reproduzir as energias de ligação. Foi somente após a introdução de um forte termo de acoplamento spin-órbita ao Hamiltoniano de partícula independente que os números mágicos puderam ser reproduzidos. A partir de então foram desenvolvidos métodos de modelo de camadas para sistematizar os dados experimentais disponíveis. Dentre os métodos desenvolvidos, temos o método de mistura de configurações no qual a matriz Hamiltoniana é construída e

diagonalizada em um espaço truncado. Um outro método é o método da projeção e variação, no qual a transformação de Hartree-Fock-Bogoliubov é usada para gerar o campo médio do estado fundamental e os estados excitados são então construídos por excitações de uma, duas ou mais quasi-partículas. Um terceiro método, é o método no qual as simetrias da Hamiltoniana efetiva são estudadas e soluções analíticas do problema são obtidas. Neste trabalho, será descrita somente a técnica de modelo de camadas usando mistura de configurações, na qual, uma camada fechada de um sistema ligado de nucleons, pode ser considerada como constituindo um caroço inerte no núcleo, e as propriedades espectroscópicas são atribuídas aos nucleons nas camadas fora do caroço. Neste trabalho, consideraremos núcleos nas camadas sd, tendo o ^{16}O como o caroço inerte.

O formalismo que descreve esta aproximação, é baseado no acoplamento sucessivo de estados de muitas partículas em camada única (single-shell) para formar um estado de multicamadas (multi-shell), como mostra a figura 2.1. Uma vez construída a base de estados de multicamadas, os elementos de matriz dos operadores físicos são calculados partindo-se dos elementos de matriz elementares dos operadores de estado.

Para desenvolver o formalismo que faça este cálculo, utiliza-se o método da segunda quantização e a expansão de todos os operadores em termos de tensores esféricos que permite o uso completo da álgebra de Racah. Desta forma cada operador pode ser decomposto em blocos de camada única, com cada bloco operando em camadas diferentes. Este formalismo é

o que será apresentado nas seções que se seguem. Na seção II-2 são introduzidos os "coeficientes de Fractional Parentage" CFP que são utilizados para a construção dos estados de muitas partículas. Na seção II-3 é apresentada a estrutura do cálculo em uma única camada e na seção II-4 este cálculo é estendido para camadas acopladas. Na seção II-5 é discutida a interação residual utilizada neste trabalho, e na seção II-6 é apresentado o código computacional que usa o formalismo apresentado para efetuar os cálculos.

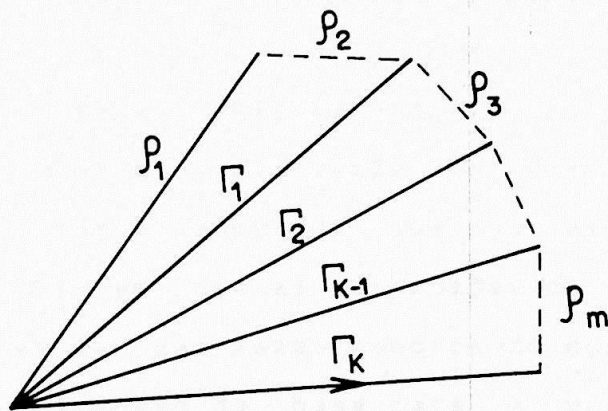


figura 2.1 representação esquemática do acoplamento de várias camadas. A camada p_1 é acoplada a camada p_2 formando a multicamada Γ_1 que por sua vez é acoplada a camada p_3 formando a multicamada Γ_2 assim sucessivamente até formar a multicamada final Γ_k .

II-2 COEFICIENTES DE FRACTIONAL PARENTAGE

Antes de introduzirmos a técnica de modelo de camadas, é importante considerar alguns aspectos dos estados da base utilizados para formar o espaço de configurações, onde geralmente é utilizado o esquema M ou esquema J.

Cálculos com o modelo de camadas utilizando o esquema M permitem a construção dos estados da base e a avaliação dos elementos de matriz do operador Hamiltoniano de uma forma simples e direta, entretanto as dimensões dos espaços dos estados são muito grandes, isto porque no esquema M todos os estados com diferentes momentos angulares são incluídos.

Cálculos utilizando o esquema J são econômicos em termos da diagonalização da matriz, porém a construção dos estados da base e a avaliação dos elementos de matriz são muito mais complicados do que no esquema M. Cálculos realizados mostram que as dimensões do espaço no esquema J são da ordem de dez vezes menores do que no esquema M. Por exemplo, a dimensão da base para a configuração com 12 partículas com $M = 0$ $T_z = 0$ no esquema M é 93710. Enquanto que a dimensão da base para a configuração com 12 partículas com $J = 3$ $T = 1$ no esquema J é 6706.

A presente técnica de modelo de camadas utiliza um espaço formado por estados no esquema J. Portanto é preciso construir os estados da base tendo o momento angular como um bom número quântico

Uma forma de se obter um estado de n partículas com um bom momento angular é baseada em um método iterativo. Vamos supor que um estado de $(n-1)$ partículas com bom momento angular $\langle 4, 7 \rangle$ tenha sido construído, e que uma partícula

extra tenha sido acoplada a este estado, para formar o estado de n partículas com um bom momento angular. Este estado antissimétrico de n partículas com um bom momento angular pode ser escrito como uma combinação linear dos estados de $(n-1)$ partículas. Os coeficientes desta combinação são chamados de "Coeficientes de Fractional Parentage" CFP

$$|j^m \alpha J\rangle = \sum [j^{m-1}(\alpha_1 j_1) j J] |j^m \alpha J\rangle |j j_2\rangle \quad (2.2)$$

O quadrado do CFP $[j^{m-1}(\alpha_1 j_1) j J]$ pode ser interpretado fisicamente como a probabilidade de que quando uma partícula é removida de um estado antissimétrico j^m acoplado a J as $(n-1)$ partículas restantes estarão em um estado antissimétrico j^{m-1} acoplado a J_1 .

Para configurações simples os CFP podem ser avaliados por fórmulas analíticas⁽⁷⁾, mas para configurações mais complicadas, seu cálculo deve ser feito numericamente. Um dos métodos frequentemente utilizado nos cálculos dos CFP é a fórmula de recorrência de Redmond⁽⁸⁾ -

$$\begin{aligned} & m [j^{m-1}(\alpha_0 j_0) j J] [j^m(\alpha_0 j_0) J] [j^{m-1}(\alpha_1 j_1) j J] [j^m(\alpha_0 j_0) J] \\ &= \sum_{\alpha_1 \alpha_0} \sum_{j_1 j_0} + (m-1) \sum_{\alpha_2 j_2} (-1)^{j_0 + j_1} \sqrt{(2j_0+1)(2j_1+1)} \begin{pmatrix} j_2 & j & j_1 \\ J & j & j_0 \end{pmatrix} \\ & \times [j^{m-2}(\alpha_2 j_2) j j_0] [j^{m-1}(\alpha_0 j_0) J] [j^{m-2}(\alpha_2 j_2) j j_1] [j^{m-1}(\alpha_1 j_1) J] \quad (2.3) \end{aligned}$$

juntamente com a técnica de ortogonalização de Schmidt. Na equação (2.3) $(\cdot \cdot \cdot)$ representa o símbolo δ_j .

A vantagem da construção de um estado de n partículas com um bom momento angular em termos dos CFP, é que uma vez conhecido os CFP para uma camada, então todo tipo de operador entre funções de onda de muitos corpos pode ser calculado. Por exemplo para o operador de dois corpos:

$$V = \sum_{i < k}^m g_{ik}$$

os seus elementos de matriz podem ser reduzidos de uma configuração de n partículas para uma configuração de $n-1$ partículas, através da fórmula « \leftarrow »:

$$\begin{aligned} & \langle j^m \alpha JM | \sum_{i < k}^m g_{ik} | j^m \alpha' JM \rangle \\ &= \frac{m}{m-2} \sum_{\alpha_1 \alpha_1' j_1} [j^{m-1}(\alpha_1 j_1) j J] \{ j^m \alpha J \} [j^{m-1}(\alpha_1' j_1) j J] \{ j^m \alpha' J \} \\ & \times \langle j^{m-1} \alpha_1 j_1 M_1 | \sum_{i < k}^{m-1} g_{ik} | j^{m-1} \alpha_1' j_1 M_1 \rangle \end{aligned} \quad (2.4)$$

Desta forma podemos reduzir os elementos de matriz de n corpos em uma soma de todos os possíveis elementos de matriz de dois corpos, tendo os CFP como coeficientes.

II-3 INFORMAÇÕES DE CAMADA ÚNICA

Para realizar cálculos com o modelo de camadas envolvendo muitas camadas, o primeiro passo é gerar todas as informações de camada única. Isto inclui todos os operadores

da base, as possíveis formas dos operadores padrões e os elementos de matriz destes operadores entre os estados da base. Uma forma muito importante para gerar estas informações nos modernos cálculos de modelo de camadas, é a utilização da técnica de segunda quantização, onde as funções de onda e os operadores são expressos em uma forma independente dos rótulos das partículas. Nesta seção será discutida a criação das informações de camada única.

A construção dos estados de muitos corpos de camada única, é feita calculando os CFP para os estados. Este cálculo é feito iterativamente através da fórmula de iteração de Redmond, eq(2.3). Após ter construído os estados de n fermions, todos os estados com o mesmo conjunto de números quânticos são agrupados para formar um espaço de estados.

No formalismo de segunda quantização, um estado de n fermions pode ser representado por um operador Z^+ , formado pela combinação linear de produtos de n operadores de criação a^+ atuando sobre o estado de vácuo $| \rangle$

$$|j^m \alpha J\rangle = Z^+(j^m \alpha J) | \rangle \quad (2.5)$$

o operador $Z^+(j^m \alpha J)$ é chamado de operador de estado. O espaço dos operadores de estado é definido da mesma forma que o espaço de estados.

O cálculo dos elementos de matriz dos operadores de estado são simplificados, pelo fato que o operador $Z^+(j^m \alpha J)$ pode ser expandido em função dos operadores $Z^+(j^{m-1} \alpha_1 J_1)$ multiplicados por a_j^+ usando os CFP.

$$Z^+(j^m \alpha J) = \sum_{\alpha_1 J_1} [j^{m-1}(\alpha_1 J_1) j J] \{ j^m \alpha J \} [Z^+(j^{m-1} \alpha_1 J_1) \times a_j^+]^J \quad (2.6)$$

de forma que os seus elementos de matriz podem ser calculados iterativamente pela fórmula (8.9)

$$\begin{aligned} \langle j^m \alpha_F J_F \| Z^+(j^m \alpha J) \| j^{m-m} \alpha_i J_i \rangle &= \sum_{\alpha_1 J_1 J_m} (-1)^{J_i + J_F + J_1 + J} \sqrt{2J+1} \\ &\times \begin{pmatrix} J_i & J_F & J \\ J_1 & J & J_m \end{pmatrix} \langle j^m \alpha_F J_F \| Z^+(j^{m-1} \alpha_1 J_1) \| j^{m-m+1} \alpha_m J_m \rangle \\ &\times \langle j^{m-m+1} \alpha_m J_m \| a_j^+ \| j^{m-m} \alpha_i J_i \rangle [j^{m-1}(\alpha_1 J_1) j J] \{ j^m \alpha J \} \quad (2.7) \end{aligned}$$

Os elementos de matriz de a_j^+ na equação (2.7) está relacionado com os CFP pela identidade.

$$\langle j^m J \| a^+ \| j^{m-1} J_1 \rangle = \sqrt{m(2J+1)} [j^{m-1} J_1 j J] \{ j^m J \} \quad (2.8)$$

assim os elementos de matriz do operador $Z^+(j^m \alpha J)$ dependem somente do conhecimento dos CFP e dos elementos de matriz já calculados do operador $Z^+(j^{m-1} \alpha_1 J_1)$

O operador conjugado do operador de estados $Z^+(j^m \alpha J)$ é definido pela relação:

$$\tilde{Z}(j^m \alpha JM) = (-1)^{J+M} [Z^+(j^m \alpha J-M)]^+ \quad (2.9)$$

onde os seus elementos de matriz podem ser obtidos a partir dos elementos de matriz dos operadores de estados multiplicados pelo fator de fase $(-1)^{J_F - J_i - J}$.

Tomando o produto vetorial dos operadores de estado e seus conjugados, nós podemos definir os operadores padrões F como:

$$F(j^{m-m} \alpha J) = [Z^+(j^m \alpha_1 J_1) \times \tilde{Z}(j^m \alpha_2 J_2)]^{JM} \quad (2.10)$$

Todos os operadores físicos na camada podem ser expandidos em termos destes operadores padrões. Da mesma forma que os operadores de estado, os operadores padrões com o mesmo conjunto de números quânticos formam uma base. O cálculo dos elementos de matriz dos operadores padrões pode ser feito iterativamente a partir dos elementos de matriz de Z e \tilde{Z} , usando a técnica de expansão de estado intermediário^(*).

$$\begin{aligned} & \langle j^m \alpha_f J_f || [Z^+(j^a \alpha_1 J_1) \times \tilde{Z}(j^b \alpha_2 J_2)]^J || j^m \alpha_i J_i \rangle \\ &= \sum_{\alpha_m J_m} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J_i & J_f & J \\ J_1 & J_2 & J_m \end{pmatrix} \langle j^m \alpha_i J_i || Z^+(j^a \alpha_1 J_1) || j^{m-a} \alpha_m J_m \rangle \\ & \times \langle j^{m-b} \alpha_m J_m || \tilde{Z}(j^b \alpha_2 J_2) || j^m \alpha_i J_i \rangle \delta_{m-a, m-b} \quad (2.11) \end{aligned}$$

estes elementos de matriz são úteis para cálculos em uma multicamada

II-4 CÁLCULO EM UMA MULTICAMADA

O objetivo essencial do cálculo com o modelo de camadas é avaliar os elementos de matriz de qualquer operador entre funções de onda de muitos corpos.

Uma camada combinada é obtida pelo acoplamento de duas camadas. A construção do espaço para os operadores de estados e operadores padrões pode ser feita da mesma forma que para camada única. Se o operador de estado para a primeira camada for $Z_1(m_1 \Gamma_1 \alpha_1)$ e para a segunda camada for $Z_2(m_2 \Gamma_2 \alpha_2)$ então o operador de estado para o espaço acoplado pode ser obtido pela seguinte relação tensorial « \otimes ».

$$Z^+(m \Gamma_Z [\alpha_1 \alpha_2]) = (-1)^{m_1 m_2} [Z_1^+(m_1 \Gamma_1 \alpha_1) \times Z_2^+(m_2 \Gamma_2 \alpha_2)]^{\Gamma_Z} \quad (2.12)$$

onde n representa o número de partículas, Γ representa o conjunto de números quânticos associados a grandezas vetoriais e α representa os números quânticos adicionais necessários para especificar o estado.

Tendo em vista que os operadores de estados de duas camadas, equação (2.12), podem ser manipulados da mesma forma que os operadores de camada única, equação (2.6), podemos considerar o acoplamento de duas camadas como constituindo uma nova camada. Sendo assim, podemos usar a relação (2.12) iterativamente para construir os operadores de estado no espaço que consistem de mais de duas camadas

Uma vez construído os operadores de estado para uma multicamada, os operadores padrões podem ser construídos por uma equação semelhante a (2.10). Contudo os elementos de matriz dos operadores padrões para uma multicamada não são facilmente calculados, porque os elementos de matriz dos operadores de estados e seus conjugados são desconhecidos. A partir dos operadores padrões da primeira camada F_1 e da segunda camada F_2 , nós obtemos os seguintes tipos de operadores padrões acoplados:

$$F_1 \times F_2 ; \tilde{F}_1 \times F_2 ; F_1 \times \tilde{F}_2 ; \tilde{F}_1 \times \tilde{F}_2 \quad (2.13)$$

Os elementos de matriz destes operadores podem ser calculados pela bem conhecida fórmula geral de redução⁽⁴⁻⁹⁾:

$$\begin{aligned} & \langle (m_{1f} J_{1f}) (m_{2f} J_{2f}) m_f J_f \parallel [F_1(m_{1J_1}) \times F_2(m_{2J_2})] J \parallel (m_{1i} J_{1i}) (m_{2i} J_{2i}) m_i J_i \rangle \\ & = (-1)^{m_3 m_{2f}} \sqrt{(2J_i+1)(2J_f+1)(2J+1)} \begin{pmatrix} J_{1f} & J_{2f} & J_f \\ J_{1i} & J_{2i} & J_i \\ J_1 & J_2 & J \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\times \langle m_{1f} J_{1f} \parallel F_1(m_{1J_1}) \parallel m_{1i} J_{1i} \rangle \langle m_{2f} J_{2f} \parallel F_2(m_{2J_2}) \parallel m_{2i} J_{2i} \rangle$$

onde m_i é o número de partículas transferidas pelos operadores e $(\begin{smallmatrix} \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{smallmatrix})$ é o símbolo 9j.

Pode ser provado que o operador padrão na camada a , pode ser expandido em termos dos operadores padrões definidos acima. Suponha que o operador padrão é composto de operadores de estado $Z^+(n_a J_a)$ e $\tilde{Z}(n_b J_b)$ na camada acoplada os quais podem ser construídos a partir dos operadores de estado nos espaços geradores como segue

$$Z^+(m_a J_a) = (-1)^{m_{a1} m_{a2}} [Z^+(m_{a1} J_{a1}) \times Z^+(m_{a2} J_{a2})]^{J_a} \quad (2.15)$$

Os operadores padrões acoplados

$$F_1(m_1 J_1) = [Z^+(m_{a1} J_{a1}) \times \tilde{Z}(m_{b1} J_{b1})]^{J_1}$$

$$F_2(m_2 J_2) = [Z^+(m_{a2} J_{a2}) \times \tilde{Z}(m_{b2} J_{b2})]^{J_2}$$

estão relacionados com o operador padrão por⁽⁴⁻⁹⁾

$$\begin{aligned}
& [Z^+(m_a J_a) \times \tilde{Z}(m_b J_b)]^J = (-1)^{(m_{a_1} + m_{b_1}) m_{a_2}} \\
& \times \sum_{J_1 J_2} \sqrt{(2J_a + 1)(2J_b + 1)(2J_1 + 1)(2J_2 + 1)} \begin{pmatrix} J_{a_1} & J_{a_2} & J_a \\ J_{b_1} & J_{b_2} & J_b \\ J_1 & J_2 & J \end{pmatrix} \quad (2.16) \\
& \times [F_1(m_1 J_1) \times F_2(m_2 J_2)]^J
\end{aligned}$$

Desta forma os elementos de matriz calculados na equação (2.14) podem ser transformados para os elementos de matriz dos operadores padrões, usando esta equação

O operador Hamiltoniano H pode ser expandido em elementos de matriz de um e dois corpos em termos dos operadores padrões. Supondo que nós já tenhamos calculado os elementos de matriz do operador $F(\theta \alpha \theta)$ entre os estados de base $|i\rangle$ e $|j\rangle$. Os elementos de matriz do operador Hamiltoniano entre esses estados podem ser expressos como:

$$\langle i || H || j \rangle = \sum_{\alpha} \langle i || F(\theta \alpha \theta) || j \rangle \langle \alpha J || H || \alpha J \rangle \quad (2.17)$$

onde $\langle \alpha J || H || \alpha J \rangle$ são os elementos de matriz de um e dois corpos. A matriz Hamiltoniana no espaço do modelo de camadas pode ser construída desta forma sendo em seguida diagonalizada fornecendo os autovalores e autovetores.

Podemos sumarizar o cálculo do modelo de camadas em uma configuração arbitrária como segue: Primeiro é preciso construir os estados de base de camada única e também os espaços dos operadores de estado e operadores padrões de camada única. Em seguida calcula-se os elementos de matriz dos operadores de estado de camada única entre estados de camada única, que podem ser calculados com as eq (2.7). Uma base de estados de multicamadas, pode ser construída por

aplicação iterativa da eq(2.12), sendo que a ordem no acoplamento das camadas é arbitrária, e cada par de camadas acopladas pode ser considerado como uma nova camada. Desta forma cada base de estados de multicamadas é completamente definida por seus constituintes de camada única. Para cada multicamada intermediária pode-se definir da mesma forma uma base de operadores padrões com uma equação semelhante a (2.10). Usando iterativamente as eqs (2.14) e (2.16), os elementos de matriz dos operadores padrões entre estados de base de uma multicamada podem ser calculados. Finalmente os elementos de matriz do operador físico, no caso o Hamiltoniano, entre funções de onda de muitos corpos podem ser calculados pela equação (2.17), formando desta forma a matriz Hamiltoniana.

II-5 INTERAÇÃO RESIDUAL

A técnica de modelos de camadas descrita nas seções anteriores, é independente do espaço escolhido e da interação que descreve o sistema. Esta técnica depende somente dos aspectos geométricos do espaço, sendo portanto aplicável tanto em teoria de modelo de camadas nuclear como atômico. Nesta seção, discutiremos o aspecto dinâmico da teoria de modelo de camadas que é essencialmente atribuído a interação residual.

Pode ser mostrado que a interação residual de n corpos em um dado espaço do modelo de camadas é completamente determinada se todos os elementos de matriz de n corpos do

operador são especificados⁽⁷⁾. Assim para especificar a interação residual de dois corpos é necessário somente conhecer todos os seus elementos de matriz de dois corpos.

Antes de determinar a interação residual, é importante saber quantos elementos de matriz de dois corpos independentes existem no espaço do modelo de camadas. O elemento de matriz de dois corpos entre estados de dois corpos com diferentes valores de J e T são nulos, isto porque o Hamiltoniano nuclear conserva o momento angular total e o número quântico de isospin. Se existirem N estados de dois corpos em um espaço com um J e T fixos, então o número de elementos de matriz de dois corpos independentes no espaço JT é igual a $N(N+1)/2$. Assim, para o espaço da camada sd existem 63 elementos de matriz de dois corpos independentes ⁽⁸⁾. Na tabela (2.1) é mostrado o espaço da camada sd com seus respectivos subespaços e os números de elementos de matriz.

Tres métodos diferentes para gerar a interação residual em um espaço do modelo do de camadas são frequentemente utilizados⁽⁹⁾. O primeiro é chamado método esquemático no qual supõe-se alguma forma específica para a interação residual. Um exemplo é a interação delta de superfície que utiliza as seguintes hipóteses:

- 1- A interação atua somente na superfície nuclear.
- 2- A força de dois corpos é de curto alcance, podendo ser aproximada por uma interação delta.
- 3- A probabilidade de encontrar uma partícula na superfície nuclear é independente da órbita do modelo na qual a partícula se move

ESPAÇO DA CAMADA sd			
MOMENTO ANGULAR (2J)	ISOSPIN (2T)	DIMENSÃO (N)	N DE TBME $N(N+1)/2$
1	3	3	6
3	1	5	15
3	3	2	3
5	1	3	6
5	3	5	15
7	1	4	10
7	3	2	3
9	1	1	1
9	3	2	3
11	1	1	3
TOTAL		63 TBME	

Tabela 2.1 espaço da camada sd para duas partículas de valência com os respectivos números de elementos de matriz de dois corpos (TBME).

Os parâmetros nestes potenciais tais como intensidade e alcance, são ajustados para uma determinada região de núcleos utilizando os dados experimentais. Este método tem a vantagem de que o número de parâmetros a serem ajustados é pequeno e desta forma, um conjunto também pequeno de dados experimentais é suficiente para determiná-los. Este método é frequentemente utilizado em cálculos com o modelo de camadas.

O segundo método é o chamado método realístico no qual a interação residual de dois corpos é derivada diretamente do espalhamento de nucleons em um espaço livre. Este método tem sido utilizado para diferentes regiões de núcleos e a interação residual de dois corpos encontrada é satisfatória.

O terceiro método para gerar a interação residual é o método empírico, no qual supõe-se que todos os elementos de matriz de um e dois corpos são parâmetros independentes e procura-se o melhor Hamiltoniano de dois corpos que reproduz os níveis de energia experimentais. Este método é útil quando um número limitado de parâmetros é suficiente para descrever um conjunto de dados experimentais. No caso de grandes camadas onde o número de elementos de matriz de dois corpos aumenta muito, seria necessário mais dados experimentais dos que existem para a determinação de todos os parâmetros. Nesta seção discutiremos apenas o método da determinação empírica da interação residual que foi utilizada neste trabalho.

Para se determinar empiricamente a interação residual é feita uma escolha do espaço do modelo de camadas e uma seleção de um conjunto de dados experimentais os quais devem

ser ajustados pela interação residual. É importante que o conjunto de dados experimentais seja tão grande quanto possível, para que as excitações do caroço e excitações de nucleons em órbitas mais energéticas fora do espaço devam também ser consideradas para permitir uma boa descrição de alguns estados dentro do espaço.

A determinação dos elementos de matriz da interação residual no método empírico, é feita expressando inicialmente os autovalores de energia em termos de parâmetros, e em seguida diagonalizando a matriz hamiltoniana para um conjunto inicial de parâmetros. Os autovalores obtidos deste conjunto inicial de parâmetros em geral não reproduzem os dados experimentais, e sempre que isto ocorre, devemos buscar um novo conjunto de parâmetros, que é feito usando o método dos mínimos quadrados. Este processo é repetido até que haja uma convergência para os dados experimentais. Este processo está ilustrado na figura 2.2 e será formulado em linguagem matemática a seguir.

As energias de um sistema nuclear são determinadas pela resolução da equação de Schroedinger

$$H\Psi = E\Psi \quad (2.18)$$

onde cada autovetor Ψ_p associado ao autovalor E_p pode ser expandido em termos dos estados de base Φ_k como

$$\Psi_p = \sum_k a_{kp} \Phi_k \quad (2.19)$$

onde os coeficientes a_{kp} da expansão obedece a relação:

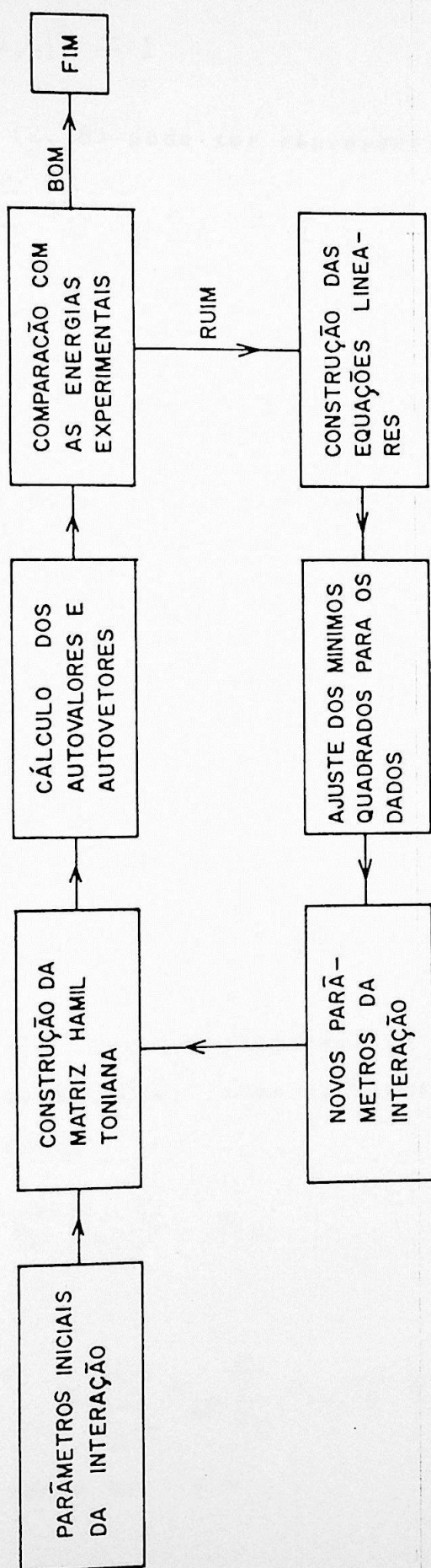


Figura 2.2: Ilustração esquemática dos vários passos necessários para se obter os parâmetros da interação residual por um ajuste das energias experimentais.

$$\sum_{k=1}^m |a_{kp}|^2 = 1 \quad (2.20)$$

A equação (2.18) pode ser representada como:

$$\sum_{j=1}^m \sum_{i=1}^m a_{jp} H_{ji} a_{ip} = E_p \delta_{pp} \quad (2.21)$$

com $p, p' = 1, \dots, N$

Tendo em vista que cada elemento de matriz H_{ij} do Hamiltoniano é uma combinação linear das energias de partícula única e/ou dos elementos de matriz de dois corpos (ambos sendo considerados parâmetros X_n) podemos escrever:

$$H_{ji} = H_{ij} = \sum_{n=1}^{N_x} C_n^{(ij)} X_n \quad (2.22)$$

onde N_x é o número de parâmetros X_n e C_n são coeficientes geométricos derivados através da álgebra de Racah. Substituindo (2.22) em (2.21) obtemos

$$\sum_{j=1}^m a_{jp} \sum_{i=1}^m \left(\sum_{n=1}^{N_x} C_n^{(ij)} X_n \right) a_{ip} = E_p \quad (2.23)$$

um rearranjo dos coeficientes da equação (2.23) produz um conjunto de equações lineares simultâneas nos parâmetros X_n escritas como:

$$\sum_{n=1}^{N_x} b_n^{(p)} X_n = E_p \quad (2.24)$$

onde

$$b_n^{(p)} = \sum_{j=1}^m a_{jp} \sum_{i=1}^m a_{ip} C_n^{(ij)} \quad (2.25)$$

com p variando de 1 a n

Pela diagonalização da matriz Hamiltoniana construída para um conjunto inicial de parâmetros, eq(2.23), obtemos as componentes a_{ij} que inseridas na equação (2.25) produz um conjunto de coeficientes $b_n^{(p)}$ para serem utilizados na equação (2.24), fornecendo desta forma os autovalores E_p . Não podemos esperar que estes autovalores reproduzam exatamente os dados experimentais.

Substituindo o lado direito da equação (2.24) pela correspondente energia experimental E_{exp} e considerando X_n como parâmetros desconhecidos, obtemos o conjunto de equações lineares:

$$\sum_{n=1}^{N_x} b_n^{(p)} X_n = E_{exp}^{(p)} \quad (2.26)$$

Usualmente consideramos muitos níveis com diferentes momentos angulares J e isospin T em vários núcleos simultaneamente, o que provoca um aumento considerável no número de equações a serem resolvidas, embora o número de parâmetros permaneça inalterado. Portanto vamos substituir o índice p , que representa o estado de uma matriz, pelo índice q , que representa o conjunto completo de equações que resultam de todas as matrizes consideradas.

$$\sum_{n=1}^{N_x} b_n^{(q)} X_n = E_{exp}^{(q)} \quad (2.27)$$

Nós queremos determinar os valores dos parâmetros X_n para que as energias experimentais sejam bem ajustadas pelo lado esquerdo da equação (2.27).

O número de equações não é igual ao número de incógnitas, e a forma padrão de se tratar este problema, é minimizar a função Q^2 definida como:

$$Q^2 = \sum_{q=1}^{N_q} \left(\sum_{i=1}^{N_x} b_i^{(q)} X_i - E_{exp}^{(q)} \right)^2 \quad (2.28)$$

variando os parâmetros X_i . o valor mínimo de Q^2 ocorre quando:

$$\frac{\partial Q^2}{\partial X_n} = 0 \quad (2.29)$$

com $r = 1 \dots N_x$

Inserindo (2.28) em (2.29) temos:

$$\frac{\partial Q^2}{\partial X_n} = \sum_{q=1}^{N_q} \left(\sum_{i=1}^{N_x} b_i^{(q)} X_i - E_{exp}^{(q)} \right) b_n^{(q)} = 0 \quad (2.30)$$

ou

$$\sum_{i=1}^{N_x} \sum_{q=1}^{N_q} b_n^{(q)} b_i^{(q)} X_i = \sum_{q=1}^{N_q} b_n^{(q)} E_{exp}^{(q)} \quad (2.31)$$

Desta forma, obtemos N_x equações lineares com N_x parâmetros, que podem ser resolvidas por métodos padrões, fornecendo um novo conjunto de parâmetros X_n para serem utilizados na eq (2.27). Este processo é repetido até que os parâmetros X_n reproduzam as energias experimentais.

Utilizando o método empírico, B.H Wildhenthal⁽¹¹⁾ determinou uma interação residual para o espaço da camada sd. Esta interação residual tem a propriedade de poder ser estendida para todo o espaço da camada, a partir do conhecimento da interação residual para o núcleo com $A=18$ pela relação (2.32). A tabela (2.2) mostra os elementos de matriz da interação para o núcleo com $A=18$

$$\langle V \rangle(A) = \langle V \rangle(A=18) (A/18)^{-0.3} \quad (2.32)$$

Tabela 2.2

a	b	c	d	2J	2T	$\langle ab V cd\rangle$ (MeV)
d5	d5	d5	d5	0	2	-2.8197000027
d5	d5	d5	d5	2	0	-1.6320999861
d5	d5	d5	d5	4	2	-1.0019999743
d5	d5	d5	d5	6	0	-1.5011999607
d5	d5	d5	d5	8	2	-0.1641000062
d5	d5	d5	d5	10	0	-4.2255997658
d5	d5	d5	s1	4	2	-0.8615999818
d5	d5	d5	s1	6	0	-1.2419999838
d5	d5	d5	d3	2	0	2.5434999466
d5	d5	d5	d3	4	2	-0.2827999890
d5	d5	d5	d3	6	0	2.2216000557
d5	d5	d5	d3	8	2	-1.2362999916
d5	d5	s1	s1	0	2	-1.3246999979
d5	d5	s1	s1	2	0	-1.1756000519
d5	d5	s1	d3	2	0	-1.1025999784
d5	d5	s1	d3	4	2	-0.6197999716
d5	d5	d3	d3	0	2	-3.1856000423
d5	d5	d3	d3	2	0	0.7221000195
d5	d5	d3	d3	4	2	-1.6220999956
d5	d5	d3	d3	6	0	1.8948999643
d5	s1	d5	s1	4	0	-1.4473999739
d5	s1	d5	s1	4	2	-0.8183000088
d5	s1	d5	s1	6	0	-3.8598001003
d5	s1	d5	s1	6	2	0.7626000047
d5	s1	d5	d3	4	0	-0.0967999995
d5	s1	d5	d3	4	2	-0.4769999981
d5	s1	d5	d3	6	0	1.2031999826
d5	s1	d5	d3	6	2	-0.6740999818
d5	s1	s1	d3	4	0	-2.0664000511
d5	s1	s1	d3	4	2	-1.9409999847
d5	s1	d3	d3	4	2	-0.4041000009
d5	s1	d3	d3	6	0	0.1887000054
d5	d3	d5	d3	2	0	-6.5057997704
d5	d3	d5	d3	2	2	1.0334000587
d5	d3	d5	d3	4	0	-3.8252999783
d5	d3	d5	d3	4	2	-0.3248000145
d5	d3	d5	d3	6	0	-0.5376999974
d5	d3	d5	d3	6	2	0.5893999934
d5	d3	d5	d3	8	0	-4.5061998367
d5	d3	d5	d3	8	2	-1.4496999979
d5	d3	s1	s1	2	0	2.1041998863
d5	d3	s1	d3	2	0	-1.7079999447
d5	d3	s1	d3	2	2	0.1873999983
d5	d3	s1	d3	4	0	0.2831999958
d5	d3	s1	d3	4	2	-0.5246999860
d5	d3	d3	d3	2	0	0.5647000074
d5	d3	d3	d3	4	2	-0.6148999929
d5	d3	d3	d3	6	0	2.0336999893
s1	s1	s1	s1	0	2	-2.1245999336

Tabela 2.2 (continuação)

a	b	c	d	2J	2T	$\langle ab v cd\rangle$ (MeV)
s1	s1	s1	s1	2	0	-3.2627999783
s1	s1	s1	d3	2	0	1.2501000166
s1	s1	d3	d3	0	2	-1.0835000277
s1	s1	d3	d3	2	0	0.0274999999
s1	d3	s1	d3	2	0	-4.2930002213
s1	d3	s1	d3	2	2	0.6065999866
s1	d3	s1	d3	4	0	-1.8193999529
s1	d3	s1	d3	4	2	-0.4063999951
s1	d3	d3	d3	2	0	0.3982999921
s1	d3	d3	d3	4	2	-0.5153999925
d3	d3	d3	d3	0	2	-2.1844999790
d3	d3	d3	d3	2	0	-1.4150999784
d3	d3	d3	d3	4	2	-0.0665000007
d3	d3	d3	d3	6	0	-2.8842000961

$$E(d5) = -3.94780 \text{ MeV}$$

$$E(s1) = -3.16354 \text{ MeV}$$

$$E(d3) = 1.64658 \text{ MeV}$$

Tabela 2.2: Elementos de matriz da interação residual para o núcleo com $A=18$. Para os demais núcleos da camada sd vale a relação $\langle V(A)\rangle = \langle V(A=18)\rangle(A/18)^{-0.3}$. d5, s1, d3 representa as órbitas $d_{5/2}$, $s_{1/2}$ e $d_{3/2}$ respectivamente.

II-6 CÓDIGO COMPUTACIONAL DE MODELO DE CAMADAS

Conforme foi discutido nas seções anteriores, o objetivo essencial do cálculo de modelo de camadas é avaliar os elementos de matriz de qualquer operador escrito no formalismo de segunda quantização entre funções de onda de muitos corpos. Estes cálculos envolvem grandes dimensões e requer a utilização de métodos computacionais para realizá-los. Nesta seção descreveremos o código computacional que realiza este tipo de cálculo.

Na década de 60 apareceu o primeiro código computacional de modelo de camadas (Oak-Ridge Rochester code), que foi desenvolvido por French e outros⁽¹⁰⁾. Este programa foi usado largamente através dos anos, mas as suas limitações não permitiam cálculos mais complicados. No início da década de 80 um novo código computacional de modelo de camadas foi desenvolvido por D. Zwarts⁽⁹⁾ com o objetivo de satisfazer as exigências de um moderno cálculo com o modelo de camadas. Este novo código permite as seguintes extensões em relação ao primeiro. Permite cálculos com números quânticos vetoriais arbitrários (permite o acoplamento LS, JJ, o uso do formalismo proton-neutron, ou mesmo o formalismo de partículas idênticas). A construção dos estados e os cálculos dos elementos de matriz de multicamada, são feitos iterativamente. Assim, o número de camadas no espaço não é restrito, e a ordem no acoplamento é completamente arbitrária, sendo definida nos cartões de entrada(Input).

Na verdade, o código computacional do modelo de camadas é formado por três programas independentes que se completam e permitem a realização do cálculo. O programa TBMCON gera os elementos de matriz de dois corpos da interação residual baseado no método empírico. O programa GENESIS (generation of Single-Shell) gera as informações de camada única e o programa propriamente dito de modelo de camadas RITSSCHIL constroi e diagonaliza a matriz hamiltoniana. Desta forma o código computacional pode ser utilizado com facilidade para diferentes regiões de núcleos reduzindo também o tempo de CPU, visto que o o cálculo é realizado por partes. O código computacional basicamente calcula os elementos de matriz reduzidos de qualquer operador tensorial em um espaço de camadas múltiplas, partindo dos elementos de matriz dos operadores em um espaço de camada única.

De acordo com o formalismo das seções anteriores, o primeiro passo para fazer cálculos com o modelo de camadas é criar todas as informações de camada única. Estas informações podem ser geradas facilmente para diferentes casos com o uso do programa GENESIS da seguinte forma. Primeiro todas as especificações necessárias são feitas sobre os parâmetros. Segundo, usando a fórmula de recorrência de Redmond, equação (2.3), os CFP são calculados para todos os estados permitidos pelas restrições dos cartões de entrada. Uma vez tendo os CFP disponíveis, na terceira parte, são calculados os elementos de matriz dos operadores de estado. Na última parte todos os operadores padrões são construídos e seus elementos de matriz são calculados usando os elementos de matriz dos operadores de

estado. Essas informações são guardadas em um arquivo denominado SSMTAP.

Uma lista completa com as especificações para o espaço de estados, para o espaço de operadores e operadores padrões é construída imediatamente e guardadas no arquivo LIBTAP.

Para calcular os elementos de matriz do operador físico, no caso o operador Hamiltoniano, entre estados de multicamadas é preciso conhecer os elementos de matriz deste mesmo operador entre estados de camada única. Estes elementos de matriz são fornecidos pelo arquivo OMETAP ao programa RITSSCHIL que constrói e diagonaliza a matriz Hamiltoniana para obter os autovalores e as correspondentes autofunções. O programa RITSSCHIL gera os arquivos com os autovalores e autovetores em disco que posteriormente poderão ser usados para se efetuar cálculos de transições. Neste trabalho realizamos apenas cálculo de diagonalização da matriz hamiltoniana para a obtenção dos autovalores e autovetores. A figura 2.3 mostra de maneira esquemática a execução completa do código computacional.

CÓDIGO COMPUTACIONAL DE MODELO DE CAMADAS

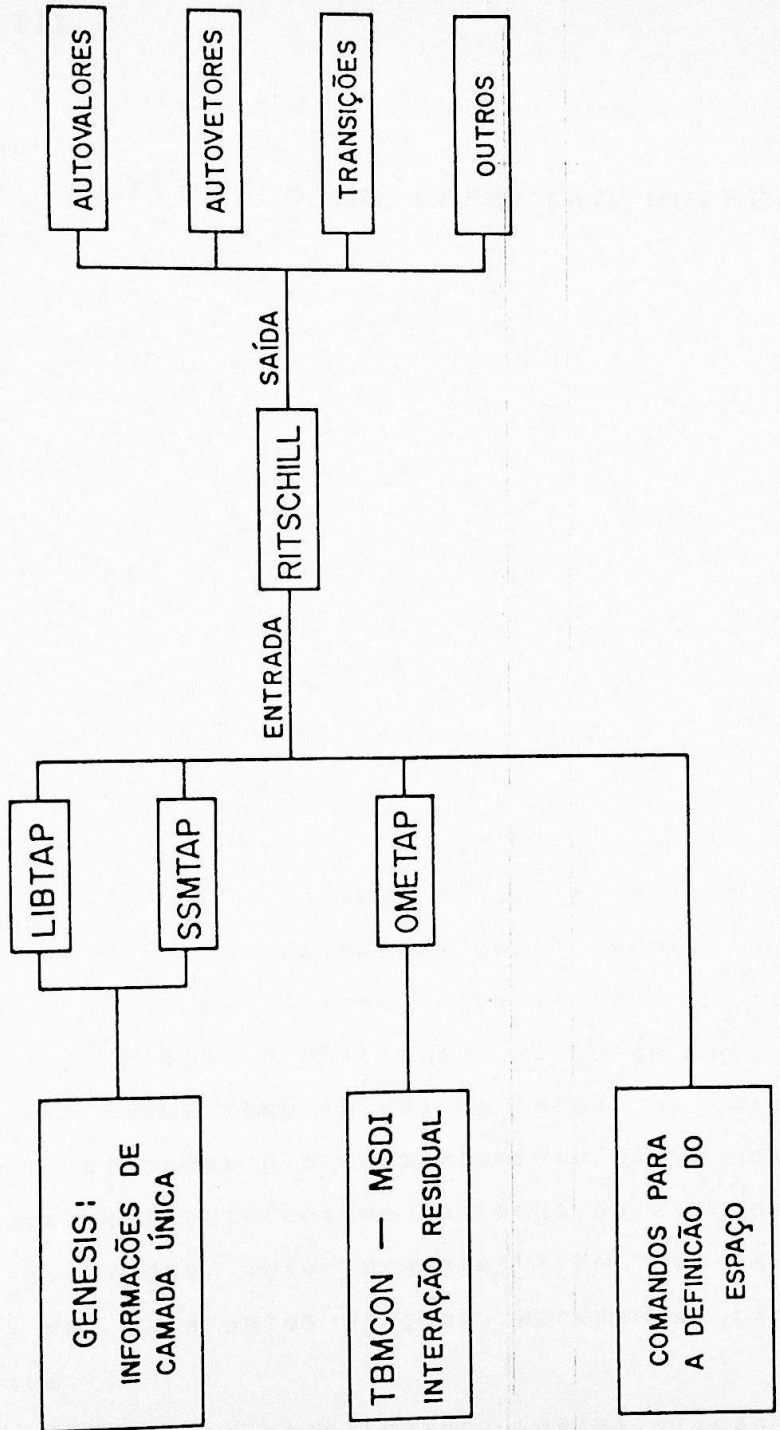


Figura 2.3: Representação esquemática do código computacional de modelo de camadas.

CAPÍTULO III

TEORIA ESTATÍSTICA DO ESPECTRO NUCLEAR

III-1 INTRODUÇÃO

Métodos estatísticos⁽¹³⁾ tem sido usualmente empregados para estudar sistemas complexos, em particular quando propriedades detalhadas não são facilmente reveladas. Por exemplo, em uma região de alta energia de excitação, os estados nucleares são tão densos e a mistura é tão forte que é muito complicado tentar explicar os estados individualmente. O que se tem feito é descrever as propriedades média do conjunto de níveis

A situação é análoga a que encontramos em mecânica estatística, onde propriedades como temperatura e entropia são apresentadas por sistemas de muitas partículas, cujo comportamento médio é descrito ao longo de uma trajetória no espaço de fases como função do tempo. No caso do espectro nuclear, o problema é o comportamento médio dos autovalores e amplitudes das autofunções ao longo do eixo de energia. Em estudos realizados anteriormente⁽¹³⁻²¹⁾ tem-se mostrado que espectros de diferentes origens apresentam características semelhantes.

O estudo das propriedades estatísticas do espectro nuclear, cuja natureza é diferente daquela revelada pelo estudo dos níveis individuais, é feito com base nos resultados da teoria das matrizes randômicas que serão

descritos nas seções seguintes. É importante frizar que teorias estatísticas não predizem uma sequência detalhada dos níveis de energia, mas descrevem o comportamento geral e as irregularidades da estrutura de níveis que é esperada ocorrer em qualquer núcleo.

Wigner foi o primeiro a propor que o comportamento estatístico local dos níveis de energia em uma sequência que possui o mesmo conjunto de números quânticos, denominada de sequência pura, é idêntico ao comportamento dos autovalores de uma matriz randômica.

De acordo com a mecânica quântica, os níveis de energia de um sistema podem conter uma parte contínua e uma parte discreta e são descritos pelos autovalores do operador Hamiltoniano. Como estaremos interessados na parte discreta de níveis do sistema quântico nuclear, trabalharemos no espaço de Hilbert de grandes dimensões, porém finito. Escolhendo um conjunto completo de funções como base, nós podemos representar o operador Hamiltoniano H como matrizes, onde os elementos destas matrizes podem ser considerados variáveis randômicas, cujas distribuições dependem somente das propriedades gerais de simetria que podemos impor sobre o conjunto de operadores. Se as funções da base são escolhidas como autofunções de quantidades conservadas, todas as matrizes Hamiltonianas do conjunto se reduzem a forma de blocos diagonais, como mostra a figura(3.1). Cada um desses blocos corresponderá unicamente a um conjunto de números quânticos, formando desta forma uma sequência pura, e os elementos de matriz fora desses blocos serão nulos. Os níveis pertencentes a dois blocos diferentes são estatisticamente não correlacionados, sendo

que os níveis pertencentes ao mesmo bloco, apresentam uma certa regularidade, como por exemplo a distribuição dos espaçamentos entre eles.

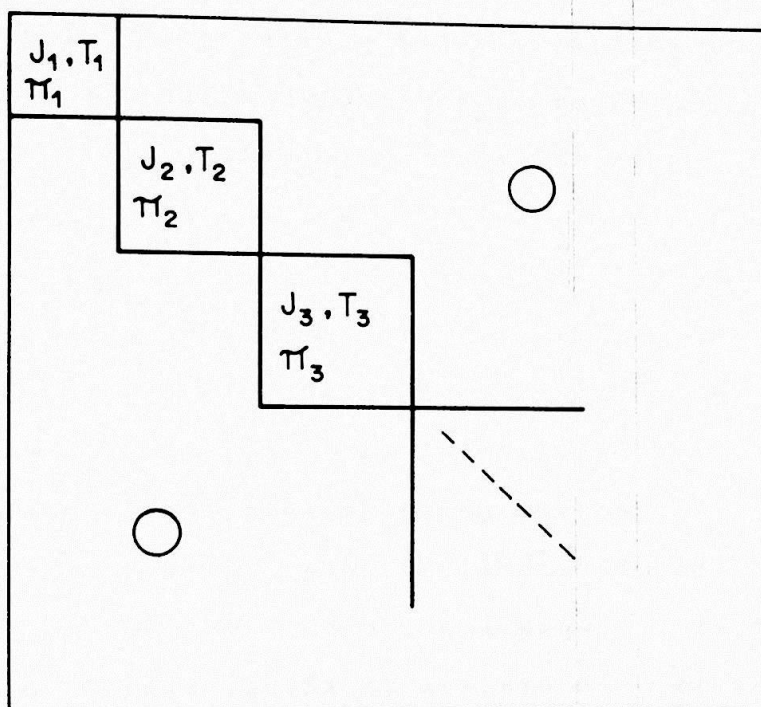


Figura 3.1 Representação de uma matriz em blocos diagonais

Uma vez tendo construído a base, vamos concentrar a atenção para um dos blocos diagonais da matriz hermitiana de ordem N . Como estudaremos os espectros nucleares que contém centenas de níveis com mesmo momento angular, isospin e paridade, estaremos interessados no limite onde N é grande.

III-2 CONJUNTO DE MATRIZES RANDÔMICAS

Antes de descrever os conjuntos de matrizes randômicas utilizados para representar um sistema, é importante considerar as propriedades de simetria que o sistema pode apresentar⁽¹²⁾. Essa análise pode fornecer informações qualitativas sobre o sistema e mesmo simplificar a resolução das equações que o descrevem.

A cada simetria do sistema estão associadas leis de conservação, isto é, a invariância das leis dinâmicas do sistema sob um grupo de simetrias dá origem a leis de conservação, sendo as quantidades conservadas denominadas constantes do movimento. Em linguagem matemática pode-se dizer que os autovalores dos operadores que comutam com o Hamiltoniano são constantes do movimento.

A existência de constantes do movimento, conduz a regras de seleção, tornando alguns processos proibidos. Por exemplo, a invariância do sistema sob reflexão espacial, tem como consequência que o operador de reflexão comuta com o Hamiltoniano, de modo que seus autovalores, a paridade dos estados, são quantidades conservadas. Desta forma, processos que conectam estados com diferentes paridades são proibidos.

Dentre as simetrias e leis de conservação apresentadas por um sistema, podemos citar que a conservação da energia está associada à invariância do Hamiltoniano por translações temporais, assim como a invariância do Hamiltoniano por translações ao longo dos eixos espaciais, conduz à conservação do momento linear total do sistema. A invariância do Hamiltoniano sob rotações dos eixos

coordenados do sistema, está associada a conservação do momento angular total, da mesma forma que a invariância do Hamiltoniano sob rotações no isoespaço, conduz a conservação do isospin.

Uma outra transformação interessante que o Hamiltoniano pode ser submetido é a reversão temporal, na qual o operador reversão temporal é um operador antiunitário que é frequentemente escrito em termos de qualquer outro operador antiunitário na forma

$$T = KC \quad (3.1)$$

onde T é antiunitário, K é unitário e C é o operador de conjugação complexa definido como

$$C\Psi = \Psi^* \quad (3.2)$$

destas definições é obvio que $C^2 = 1$

Um operador A transforma-se sob reversão temporal como:

$$A^R = KA^TK^{-1} \quad (3.3)$$

onde A^T é o transposto de A . O operador A é dito auto-dual se $A^R = A$. Um sistema físico é invariante sob reversão temporal se o Hamiltoniano for auto-dual, isto é

$$H^R = H \quad (3.4)$$

Quando a representação de estados sofrer transformações unitárias, $\Psi \rightarrow U\Psi$ o operador T transforma-se como:

$$T \rightarrow UTU^{-1} = UTU^+ \quad (3.5)$$

Assim o operador K transforma-se como

$$K \rightarrow UKU^T \quad (3.6)$$

Por dupla aplicação do operador reversão temporal T , o estado permanece inalterado, a menos de uma constante

$$T^2 \Psi = \lambda \Psi \quad (3.7)$$

usando as relações (3.1) e (3.6) podemos escrever:

$$T^2 = KK^* \quad (3.8)$$

do fato que K é unitário temos:

$$KK^* = \lambda \quad (3.9a)$$

$$KK^T = 1 \quad (3.9b)$$

multiplicando a equação (3.9a) por K^T obtemos

$$K = \lambda K^T \quad (3.10)$$

Da relação (3.10) temos que

$$K^T = (\lambda K^T)^T \quad (3.11)$$

substituindo (3.11) em (3.10) temos

$$K = \lambda^2 K \quad (3.12)$$

de modo que

$$\lambda^2 = \pm 1 \quad (3.13)$$

assim de (3.8), (3.9) e (3.13) temos:

$$T^2 = \pm 1 \quad (3.14)$$

Os conjuntos de matrizes randômicas são construídos considerando principalmente a simetria do sistema sob

reversão temporal. Primeiro para sistemas sem invariância sob reversão temporal, a matriz Hamiltoniana que o descreve é uma matriz arbitrária, não restrita a ser real nem mesmo auto-dual. Estes sistemas são representados pelo conjunto Gaussiano unitário (GUE) definido no espaço das matrizes hermitianas, de modo que o operador H , transforma-se como:

$$H' = U^{-1} H U \quad (3.15)$$

onde U é qualquer matriz unitária.

Os sistemas invariantes sob reversão temporal, mas que não possuam simetria rotacional, estão associados a matrizes reais antissimétricas, isto é, a equação (3.14) satisfaz a condição:

$$T^2 = -1$$

Estes sistemas são representados pelo conjunto Gaussiano simplético (GSE), definido no espaço das matrizes Hermitianas alto-duais, com o operador Hamiltoniano transformando-se como:

$$H' = W^R H W \quad (3.16)$$

onde W é qualquer matriz simplética definida da seguinte forma. Sendo A uma matriz real antissimétrica, existe uma matriz ortogonal B que transforma A em uma forma canônica:

$$Z = B^T A B \quad (3.17)$$

onde Z é uma matriz real antissimétrica, cujos os únicos elementos não nulos estão em blocos 2×2 ao longo da diagonal



principal. Em linguagem matemática, podemos representar Z como:

$$Z_{2j, 2j-1} = -Z_{2j-1, 2j} = \mu_j \quad ; \quad \mu_j \text{ REAL}$$

$$Z_{jk} = 0$$
(3.18)

uma matriz pertencente ao grupo simplético, é definida de forma que:

$$WZW^T = Z$$
(3.19)

Os sistemas invariantes sob reversão temporal e que também possuem simetria rotacional, de modo que a equação (3.14) satisfaça a condição:

$$T^2 = 1$$

estão associados a matrizes reais simétricas. Este é o caso do sistema nuclear que estamos interessados em estudar. Estes sistemas são representados pelo conjunto Gaussiano Ortogonal (GOE) que será descrito na próxima seção.

III-3 CONJUNTO GAUSSIANO ORTOGONAL (GOE).

O conjunto gaussiano ortogonal (GOE) é definido no espaço de matrizes reais simétricas como⁽¹⁻³⁾:

1- o conjunto é invariante sob qualquer transformação do tipo

$$H \rightarrow W^T H W$$
(3.20)

onde W é qualquer matriz ortogonal.

2- Os elementos de matriz H_{kj} , $k < j$ são estatisticamente independentes, isto é, a função probabilidade de densidade é um produto de funções, onde cada uma delas depende de uma só variável.

$$P(H) = \prod_{k < j} f_{kj} H_{kj} \quad (3.21)$$

Pode-se mostrar que $P(H)$ é escrita como «1-3»

$$P(H) = C_N \text{EXP}[-(H_{11}^2 + H_{22}^2 + \dots + H_{NN}^2)/4\sigma^2] \quad (3.22)$$

onde σ^2 é a dispersão quadrática média dos elementos de matriz fora da diagonal, e C_N é uma constante de normalização.

Como estamos interessados no espectro nuclear, é importante saber como os autovalores se distribuem ao longo do eixo de energia. O problema então é substituir os elementos de matriz do Hamiltoniano em (3.22) pelos autovalores e para isso é preciso calcular o jacobiano da transformação. Este Jacobiano pode ser escrito como «1-3»:

$$J_N = \prod_{\mu < \nu} |E_\mu - E_\nu| h(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_m) \quad (3.23)$$

onde h são funções que não dependem dos autovalores. Desta forma a expressão (3.22) pode ser convertida para a distribuição dos autovalores, denominada distribuição de Wishart «1-3»

$$P(E_1, E_2, \dots, E_N) = C_N \prod_{\mu < \nu} |E_\mu - E_\nu| \text{EXP}\left(-\frac{1}{4\sigma^2} \sum_{\lambda=1}^N E_\lambda^2\right) \quad (3.24)$$

III-3.1 DISTRIBUIÇÃO DOS ESPAÇAMENTOS DE NÍVEIS

Um comportamento estatístico associado com a distribuição da densidade de níveis é o comportamento dos espaçamentos entre os níveis vizinhos, que é uma propriedade local a uma dada energia. Considerando a densidade de níveis como função da energia de excitação e tomando um intervalo de energia δE centrado em E , que seja muito menor comparado com E e que seja grande o suficiente para conter muitos níveis. isto é:

$$E \gg \delta E \gg D$$

onde D é o espaçamento médio entre os níveis vizinhos. Queremos saber como os níveis estão distribuídos neste intervalo.

A flutuação da função densidade em torno de uma energia média, provoca uma flutuação randômica nos espaçamentos de níveis do espectro, gerando uma distribuição de espaçamentos $P(X)$ onde X é o k -ésimo espaçamento entre estados vizinhos, em unidades do espaçamento médio local D . Será deduzida aqui uma função distribuição para o caso particular de uma matriz bidimensional, mas esta distribuição tem validade para um caso mais geral de uma matriz de ordem N .

Os autovalores de uma matriz bidimensional são distribuídos, de acordo com (3.24) como

$$P(E_1, E_2) = C_2 |E_1 - E_2| \exp \left[-\frac{1}{4\sigma^2} (E_1^2 + E_2^2) \right] \quad (3.25)$$

Para calcular o valor da constante C_2 é conveniente usar as variáveis auxiliares s e t definidas como:

$$s = (E_2 - E_1) / 2\sigma \quad (3.26)$$

$$t = (E_2 + E_1) / 2\sigma$$

Assim podemos escrever (3.25) na forma

$$P(E_1, E_2) = 2s\sigma C_2 \text{EXP} \left[-\frac{1}{2}(s^2 + t^2) \right] \quad (3.27)$$

Normalizando esta expressão, com o auxílio da relação

$$\int_0^{\infty} x^m e^{-bx^2} dx = \frac{\Gamma[(m+1)/2]}{2b^{(m+1)/2}}$$

Obtemos

$$C_2 = \frac{1}{8\sigma^3 \sqrt{2\pi}} \quad (3.28)$$

Com a mudança de variáveis feita em (3.26), se substituirmos s por $S/2\sigma$, onde S é o espaçamento entre os níveis e t por $\langle E \rangle / \sigma$, obtemos uma função distribuição para os espaçamentos S .

$$P(S, E) = 2C_2 S \text{EXP}(-S^2/8\sigma^2) \text{EXP}(-\langle E \rangle^2/2\sigma^2) \quad (3.29)$$

a forma da expressão (3.29) mostra uma independência estatística dos espaçamentos dos autovalores S e o autovalor médio $\langle E \rangle$. Realizando a integração sobre $\langle E \rangle$, obtemos a expressão para a distribuição dos espaçamentos de níveis.

$$P(S) = 2\sigma C_2 S \sqrt{\pi} \text{EXP}(-S^2/8\sigma^2) \quad (3.30)$$

Uma forma mais convencional para a expressão acima seria escreve-la em termos da variável adimensional X , definida como $X=S/D$ onde D é o espaçamento médio dado por:

$$D = \langle S \rangle = \int_0^{\infty} S P_2(S) dS \quad (3.31)$$

inserindo (3.30) em (3.31)

$$D = 2C_2 \sigma \sqrt{\pi} \Gamma(3/2) (8\sigma^2)^{3/2} \quad (3.32)$$

usando (3.28) temos

$$D = \sqrt{2\pi} \sigma \quad (3.33)$$

Substituindo $S=DX$ em (3.30), podemos calcular $P(X)$ da seguinte forma:

$$P(X) = D P(S)$$

$$P(X) = 2D^2 X C_2 \sigma \sqrt{2\pi} \text{EXP}(-D^2 X^2 / 8\sigma^2) \quad (3.34)$$

Usando (3.28) e (3.33) obtemos:

$$P(X) = \frac{\pi X}{2} \text{EXP}(-\pi X^2 / 4) \quad (3.35)$$

a expressão (3.35) é conhecida como distribuição de Wigner e mostra como os espaçamentos entre os níveis vizinhos de um conjunto de matrizes randômicas ortogonais se distribuem em função da variável adimensional X .

III-3.2 DISTRIBUIÇÃO DAS AMPLITUDES DAS AUTOFUNÇÕES

Dentro da teoria das matrizes randômicas, um outro objeto importante de estudo, é o comportamento estatístico das amplitudes a_{ij} associadas com os vetores de base $|i\rangle$ que são usados para a construção dos estados nucleares $|j\rangle$. Para construir um conjunto de matrizes, é suposto que uma base de estados $|i\rangle$ em termos dos quais toda a matriz do conjunto é construída. Um autoestado pode ser expandido como:

$$|j\rangle = \sum_{i=1}^N a_{ij} |i\rangle \quad (3.36)$$

com

$$\sum |a_{ij}|^2 = 1 \quad (3.37)$$

onde a_{ij} é a i -ésima componente do j -ésimo autovetor da matriz em questão. Os a_{ij} são quantidades que variam aleatoriamente através do conjunto. Veremos a seguir como estas amplitudes se distribuem.

Em uma dimensão, um vetor unitário pode ter somente as componentes ± 1 , neste caso a distribuição é

$$P_1(a) = \delta(|a| - 1) \quad (3.38)$$

Onde $\delta(a)$ é a função delta de Dirac. Em duas dimensões temos:

$$P_2(a) = P_2(\varphi) \frac{d\varphi}{da} \quad (3.39)$$

com $P_2(\varphi) = c^{re}$. Como $a = \cos\varphi$, temos que

$$P_2(a) = \frac{c^{re}}{\text{sen}\varphi} = \frac{c^{re}}{\sqrt{1-a^2}} \quad (3.40)$$

Em três dimensões o argumento é semelhante e neste caso, a orientação randômica é ponderada em intervalos angulares de acordo com o ângulo sólido

$$d\Omega_3 = \text{SEN}\theta d\theta d\varphi \quad (3.41)$$

onde consideramos θ como eixo de interesse. Desde que queremos a distribuição da componente $a = \text{COS}\theta$ temos

$$P_3(a) = P_3(\theta) \frac{d\theta}{da} = C^{\text{te}} \quad (3.42)$$

Para deduzir a expressão $P_N(a)$, é preciso introduzir o sistema de coordenadas para N dimensões

$$\begin{aligned} q_1 &= \text{COS}\theta \\ q_2 &= \text{SEN}\theta \text{COS}\varphi_1 \\ q_3 &= \text{SEN}\theta \text{SEN}\varphi_1 \text{COS}\varphi_2 \\ &\vdots \end{aligned} \quad (3.43)$$

$$q_{N-3} = \text{SEN}\theta \text{SEN}\varphi_1 \text{SEN}\varphi_2 \dots \text{SEN}\varphi_{N-3} \text{COS}\varphi_{N-2}$$

$$q_N = \text{SEN}\theta \text{SEN}\varphi_1 \text{SEN}\varphi_2 \dots \text{SEN}\varphi_{N-3} \text{SEN}\varphi_{N-2}$$

onde

$$\begin{aligned} 0 &< \theta < \pi \\ 0 &< \varphi_i < \pi, \quad i = 1, 2, \dots, N-3 \\ -\pi &< \varphi_{N-2} < \pi \end{aligned} \quad (3.44)$$

O ângulo sólido diferencial para N dimensões é escrito como:

$$d\Omega_N = \text{SEN}^{N-2}\theta \text{SEN}^{N-3}\varphi_1 \text{SEN}^{N-4}\varphi_2 \dots \text{SEN}\varphi_{N-3} d\theta d\varphi_1 \dots d\varphi_{N-2} \quad (3.45)$$

Integrando a expressão (3.45) nos limites dados por (3.44), obtemos

$$\Omega_N = \Omega_\theta \Omega_\varphi = \left[\frac{\pi \cdot 2^{4-N} \Gamma(N-2)}{N-2 \Gamma^2[(N-2)/2]} \right] \left[\frac{2\pi^{[(N-1)/2]}}{\Gamma[(N-1)/2]} \right] \quad (3.46)$$

A distribuição de probabilidade para a componente do vetor unitário $a = \cos\theta$ é facilmente obtida pela definição:

$$P_N(a) = \frac{1}{\Omega_N} \int \int \cdots \int d\Omega_N \delta(a - \cos\theta) \quad (3.47)$$

integrando temos:

$$P_N(a) = \frac{1}{\Omega_\theta \Omega_\varphi} \Omega_\varphi \int \text{sen}^{N-2} \theta \delta(a - \cos\theta) \quad (3.48)$$

Fazendo $\mu = \cos\theta$, obtemos

$$P_N(a) = \frac{1}{\Omega_\theta} \int_{-1}^{+1} (1-\mu)^{\frac{N-3}{2}} \delta(a-\mu) d\mu \quad (3.49)$$

Usando a propriedade da função delta

$$\int F(x) \delta(x-a) dx = F(a) \quad (3.50)$$

temos:

$$P_N(a) = \frac{1}{\Omega_\theta} (1-a^2)^{\frac{N-3}{2}} \quad (3.51)$$

pela expressão (3.46) temos que:

$$\Omega_{\theta} = \frac{\pi^{1/2} 2^{4-N} \Gamma(N-2)}{(N-2) \Gamma^2[(N-2)/2]} \quad (3.52)$$

Usando as propriedades da função gama:

$$\Gamma(N-2) = \frac{2^{N-3}}{\sqrt{2\pi}} \Gamma\left(\frac{N-2}{2}\right) \Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right) \quad (3.53)$$

$$\frac{N-2}{2} \Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right) = \Gamma(N/2)$$

obtemos que:

$$\Omega_{\theta} = \frac{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)}{\Gamma(N/2)} \quad (3.54)$$

Substituindo (3.54) em (3.51) obtemos:

$$P_N(\alpha) = \frac{\Gamma(N/2)}{\sqrt{\pi} \Gamma[(N-1)/2]} (1-\alpha^2)^{\frac{N-3}{2}} \quad (3.55)$$

Como estamos interessados no estudo de estados nucleares, onde a matriz Hamiltoniana que descreve o sistema tem grandes dimensões, é importante obter o comportamento da distribuição (3.55) quando N assume grandes valores. Para grandes valores de N temos que:

$$\frac{\Gamma(N/2)}{\sqrt{\pi} \Gamma\left(\frac{N-1}{2}\right)} \rightarrow \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \quad (3.56)$$

de modo que:

$$P_N(\alpha) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} (1-\alpha^2)^{\frac{N}{2}} \quad (3.57)$$

Expandindo $(1-\alpha^2)^{N/2}$ em séries de potências, podemos escrever (3.57) como:

$$P_N(\alpha) = \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \text{EXP}\left(-\frac{N\alpha^2}{2}\right) \quad (3.58)$$

Este resultado é conhecido como a distribuição de Porter-Thomas⁽²²⁾ para as amplitudes

RESULTADOS E DISCUSSÃO

UN

Para gerar as amplitudes a_{α} e a_{β} utilizamos a técnica de Monte Carlo, realizando cálculos em um espaço de parâmetros α e β escolhido de modo a obter a distribuição desejada. Os resultados são apresentados em gráficos de amplitude versus α e β .

$$a_{\alpha} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \exp\left(-\frac{\alpha^2}{2}\right)$$

Para gerar as amplitudes a_{α} e a_{β} utilizamos a técnica de Monte Carlo, realizando cálculos em um espaço de parâmetros α e β escolhido de modo a obter a distribuição desejada. Os resultados são apresentados em gráficos de amplitude versus α e β .

CAPÍTULO IV

RESULTADOS E DISCUSSÕES

IV-1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados dos estudos que realizamos sobre o comportamento estatístico dos autovalores e das amplitudes das autofunções do espectro nuclear que foram obtidos com a técnica de modelo de camadas que foi descrita no capítulo II. Basicamente estudamos a distribuição dos espaçamentos entre os níveis vizinhos do espectro (S) e a distribuição das amplitudes das autofunções a_{ij} em grupos de autofunções por intervalo de energia, como mostra o esquema a seguir:

$$H \begin{cases} E - S \\ \psi - a_{ij} \end{cases}$$

Para gerar os autovalores e autofunções, objetos de nosso estudo, realizamos cálculos com o modelo de camadas no espaço da camada sd , utilizando a interação residual de Wildenthal⁽¹¹⁾ determinada empiricamente (seção II-5).

Para efetuar os cálculos, utilizamos o formalismo de isospin, onde prótons e nêutrons são considerados como partículas idênticas. A vantagem na utilização do formalismo de isospin, é que apesar das informações iniciais de

partícula única serem muito extensas, as dimensões da multicamada final são menores do que as que são obtidas usando um outro formalismo

A dimensão da base da multicamada final varia muito, chegando mesmo a atingir ordens elevadas. Para um determinado momento angular J e isospin T , a dimensão da base cresce com o número de partículas de valência. Por exemplo para a configuração $(sd)^2$ $J = 1/2$ $T = 1/2$ a dimensão da base é 109 e para a configuração $(sd)^2$ $J = 1/2$ $T = 1/2$ a dimensão da base é 517. As tabelas 4.1, 4.2, 4.3 e 4.4 mostram as dimensões características para 5, 7, 8 e 10 partículas de valência com todos os momentos angulares J e isospin T possíveis. Neste trabalho estudamos matrizes com dimensão de $N = 109$ ($A=21$, $J=1/2$ $T=1/2$), caso estudado por Brown e Bertsch⁽²⁾ até $N=3011$ ($A=26$ $J=1$ $T=1$). Na tabela 4.5 são apresentados todos os casos que serão analisados nas seções seguintes.

IV-2 MÉTODO DE ANÁLISE

Nesta seção será descrito o método utilizado para analisar o comportamento dos autovalores e amplitudes das autofunções.

A) AUTOVALORES

A propriedade local associada com a densidade de níveis é o espaçamento entre os níveis vizinhos(S) calculado por:

$$S = |E_i - E_{i+1}| \quad (4.1)$$

onde E_i é a energia do i -ésimo estado. A distribuição dos espaçamentos é usualmente construída em função da variável adimensional X definida como:

$$X = S/D \quad (4.2)$$

onde D é o espaçamento médio entre os níveis.

Para se obter a distribuição dos espaçamentos entre os níveis vizinhos (S), o conjunto dos autovalores foi dividido em sub-intervalos menores, onde para cada sub-intervalo foi calculado um valor para o espaçamento médio D e um correspondente valor para a variável X , conforme a eq (4.2). Desta forma para cada sub-intervalo é construída uma distribuição (distribuição intermediária) pela contagem do número de espaçamentos por unidade da variável X . No fim deste processo, as contribuições de todos os sub-intervalos são agrupadas para formar a distribuição final.

Para que a distribuição calculada (histograma) possa ser comparada com a distribuição de Wigner, eq(3.35) é necessário que esta última seja multiplicada pela largura de cada intervalo do histograma, que por questão de uniformidade foi adotado como sendo 0.1 para todos os casos estudados, e pelo número de espaçamentos existentes. Desta forma podemos escrever (3.35) como:

$$P(x) = \frac{N}{10} \frac{\pi x}{2} \text{EXP}(-\pi x^2/4) \quad (4.3)$$

B) AMPLITUDES DAS AUTOFUNÇÕES

Como as autofunções são normalizadas, os módulos de suas amplitudes estão distribuídos no intervalo [0-1]. Em uma primeira análise foi verificado que os módulos das amplitudes estão distribuídos quase que em sua totalidade (95%) no intervalo [0-0.2], isto é válido para todos os casos estudados. Desta forma consideramos apenas este intervalo significativo e o redividimos em sub-intervalos menores e calculamos a distribuição dos módulos das amplitudes por intervalo de energia. Para uniformizar todos os casos estudados, os intervalos das subdivisões foram tomados como:

$$\Delta Z = \frac{1}{20\sqrt{N}} \quad (4.4)$$

onde N é a dimensão da base.

Para poder comparar a distribuição calculada (histograma) com a distribuição estatística de Porter-Thomas (PT), eq(3.58), é necessário fazer a seguinte transformação nesta última:

$$a_{ij} = \frac{Z}{20\sqrt{N}} \quad (4.5)$$

Substituindo (4.5) em (3.58) obtemos

$$P(Z) = C \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \exp(-Z^2/800) \quad (4.6)$$

onde C é uma constante de normalização. Normalizando esta expressão a área unitária

$$\int_{-\infty}^{\infty} P(Z) dz = C \sqrt{\frac{N}{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \text{EXP}(-Z^2/800) dz = 1$$

obtemos que a constante C é dada por:

$$C = \frac{1}{20\sqrt{N}} \quad (4.7)$$

Assim a equação (3.58) nesta nova unidade toma a forma

$$P(Z) = \frac{1}{20\sqrt{2\pi}} \text{EXP}(-Z^2/800) \quad (4.8)$$

Como esta função Gaussiana é simétrica em relação a origem e estamos interessados na distribuição de $|Z|$ podemos escrever

$$P(|Z|) = \frac{1}{20} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \text{EXP}(-Z^2/800) \quad (4.9)$$

IV-3 DISCUSSÕES

Para os quatro primeiros casos apresentados na tabela 4.5, nós calculamos todos os autovalores e verificamos que suas distribuições como função da energia de excitação são ajustadas por distribuições Gaussianas (fig 4.1). Para os demais casos calculamos apenas os 200 primeiros autovalores e autovetores.

Baseado na seção anterior, as distribuições de espaçamentos entre os níveis vizinhos(5) para as diversas configurações apresentadas na tabela(4.5) foram calculadas e os respectivos gráficos estão mostrados nas fig(4.2-4.5)

Analisando os histogramas destas figuras, podemos notar que pequenos espaçamentos têm pequena probabilidade de ocorrer, este fato é conhecido como repulsão dos níveis e é uma característica peculiar dos autovalores de uma sequência pura. A curva contínua mostrada nestas figuras é a

distribuição de Wigner convenientemente modificada, eq(4.3). No caso de não se obedecer na sequência de autovalores o mesmo conjunto de números quânticos, a repulsão entre os níveis (ausência de pequenos espaçamentos) é perdida, isto porque um nível não tem influência sobre outro. Para verificar este fato, nós construímos uma sequência mista formada pelos autovalores das configurações com 5 partículas com $T = 1/2$ e $J = 1/2, 3/2$ e $5/2$. Esta distribuição está mostrada na figura(4.6) e é ajustada pela distribuição de Poisson

$$P(x) = e^{-x} \quad (4.10)$$

que também é mostrada na figura. Esta curva foi multiplicada por $N/10$, onde $N=519$ é o número de espaçamentos e $(1/10)$ é a largura dos intervalos do histograma para que a comparação pudesse ser feita.

A análise das amplitudes das autofunções foi efetuada em intervalos de energia conforme é mostrado na tabela(4.5). A distribuição calculada das amplitudes das autofunções pode ser comparada graficamente com a (PT), como está apresentado nas figuras(4.7-4.15) e/ou por uma quantidade numérica Q que mede o desvio entre a PT e a distribuição calculada. Nós definimos esta quantidade numérica como:

$$Q = \sum_{n=1}^m |P_{CAL}^{(n)} - P_{PT}^{(n)}| \quad (4.11)$$

onde m é o número total de intervalos usados na construção do histograma.

Brown e Bertsch (BB) introduziram o parâmetro λ , definido como a razão entre a dispersão média do elemento de

matriz fora da diagonal $\langle H \rangle_{\text{OFF}}$ e o espaçamento médio entre os níveis vizinhos (D) no intervalo, para medir a estatisticalidade das autofunções.

$$\lambda = \frac{\langle H \rangle_{\text{OFF}}}{D} \quad (4.12)$$

Foi sugerido que quando $\lambda > 1$, os níveis individuais perderiam memória de sua localização na parte diagonal do Hamiltoniano e a distribuição calculada das amplitudes estaria muito próxima da PT.

Os resultados da nossa análise numérica das autofunções estão sumarizadas na tabela 4.5, onde para cada caso é mostrado o número de estados por intervalo de energia e os correspondentes valores de Q e λ . Pode ser visto dos valores apresentados na tabela 4.5 que para todos os autovetores estudados, o conjunto que melhor se aproxima da PT (menores valores de Q) são aqueles nos intervalos de energia de excitação 25 -30 MeV para os casos A=21(N=109) A=23(N=517), 24.07-27.92MeV para o caso A=21(N=188) e 21.62-25.06MeV A=21(N=223), as menores dimensões analisadas. Para os casos com A=21 estes intervalos de energias correspondem ao pico da distribuição gaussiana dos autovalores, fig.4.1, como função da energia de excitação. Para o caso com A=23 o intervalo de energia está um pouco abaixo da região de pico da distribuição gaussiana dos autovalores.

Para estes casos, assim como para todos os demais casos com dimensões maiores, o valor mínimo de Q corresponde a um valor máximo de λ para os intervalos de energia estudados. Exceto para os casos com A=21 onde os estados se estendem sobre o pico da densidade de níveis, o valor de λ

aumenta, e o valor de Q diminui, com o aumento da energia de excitação. Notamos ainda que os valores de λ são maiores do que o critério de BB e também são consideravelmente maiores que o valor 2.6 obtido para o exemplo de BB ($A=21$, $J=1/2$, $T=1/2$).

Contudo os casos de maiores dimensões que nós estudamos apresentam o valor mínimo de Q muito maior que o valor mínimo obtido nos casos citados anteriormente. Portanto é aparente que uma simples inspeção do valor de λ sózinho não prover um índice de randomicidade. A condição de λ ser maior que a unidade pode ser considerada como necessária, mas não suficiente, para que as amplitudes dos autovetores sejam distribuídas randômicamente.

Nossos resultados sugerem que os autovetores completamente randômicos não são associados com qualquer valor arbitrário de λ mas simplesmente com o pico de energia da distribuição dos autovalores (região de máxima densidade de níveis). Nos casos de dimensões maiores, a randomicidade não é obtida, mesmo para regiões com grande valor de λ , porque a energia de excitação dos 200 autovetores estão significativamente abaixo da região do pico. Esta conclusão parece ser uma consequência direta do fato que nosso Hamiltoniano do modelo de camadas é caracterizado, realisticamente, por energias de "single-particle" não degeneradas e os autovetores têm em média uma ocupação randômica maior das órbitas $d_{5/2}$ e $s_{1/2}$ e uma ocupação randômica menor na órbita $d_{3/2}$. No caso de considerarmos as energias de "single-particle" degeneradas, o comportamento caótico se torna mais evidente. Como mostra

a figura (4.16) para os primeiros intervalos dos casos com $N=188$ e $N=517$ onde temos $Q=17$ e $\lambda = 1.24$ e $Q=19$ e $\lambda = 0.5$ respectivamente.

NÚMERO DE PARTÍCULAS = 5				
2J	2T = 1	2T = 3	2T = 5	
1	109	75	15	
3	188	129	24	
5	223	148	29	
7	209	136	23	
9	167	103	17	
11	111	64	8	
13	64	33	3	
15	29	12	0	
17	11	3	0	
19	2	0	0	

Tabela 4.1 Dimensões das configurações com 5 partículas de valência na camada sd

NÚMERO DE PARTÍCULAS = 7				
2J	2T = 1	2T = 3	2T = 5	2T = 7
1	517	425	132	15
3	923	749	230	24
5	1142	917	273	29
7	1158	906	259	23
9	1011	771	205	17
11	773	560	135	8
13	518	356	74	3
15	300	188	31	0
17	150	83	10	0
19	59	27	1	0
21	18	6	0	0
23	3	0	0	0

Tabela 4.2 Dimensões das configurações com 7 partículas de valência na camada sd.

NÚMERO DE PARTÍCULAS = 8						
2J	2T = 0	2T = 2	2T = 4	2T = 6	2T = 8	
0	325	481	287	59	9	
2	779	1413	721	171	12	
4	1206	1992	1068	231	21	
6	1304	2268	1135	246	15	
8	1311	2131	1071	206	15	
10	1070	1791	826	150	6	
12	835	1293	581	87	3	
14	531	843	330	42	0	
16	329	460	169	14	0	
18	154	222	62	3	0	
20	70	81	20	0	0	
22	19	24	2	0	0	
24	6	3	0	0	0	

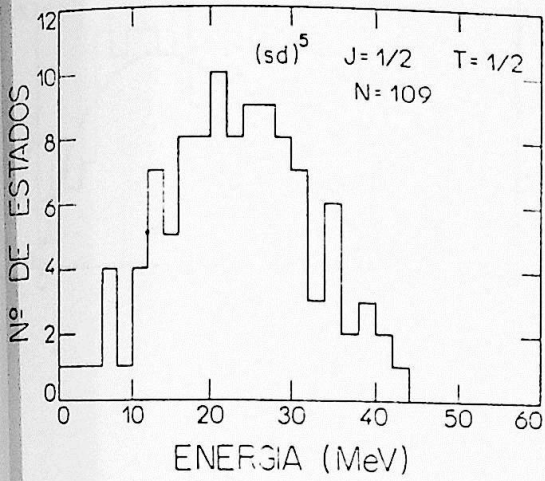
Tabela 4.3 Dimensões das configurações com 8 partículas de valência na camada sd

NÚMERO DE PARTÍCULAS = 10						
2J	2T = 0	2T = 2	2T = 4	2T = 6	2T = 8	2T = 10
0	565	1132	620	191	22	3
2	1753	3011	1783	468	64	2
4	2474	4500	2535	690	82	5
6	2941	5069	2866	714	82	2
8	2845	5028	2700	658	63	2
10	2551	4274	2248	485	40	0
12	1953	3316	1619	326	19	0
14	1402	2226	1038	170	7	0
16	850	1361	562	80	1	0
18	483	694	263	24	0	0
20	216	316	95	6	0	0
22	91	106	26	0	0	0
24	24	30	3	0	0	0
26	6	3	0	0	0	0

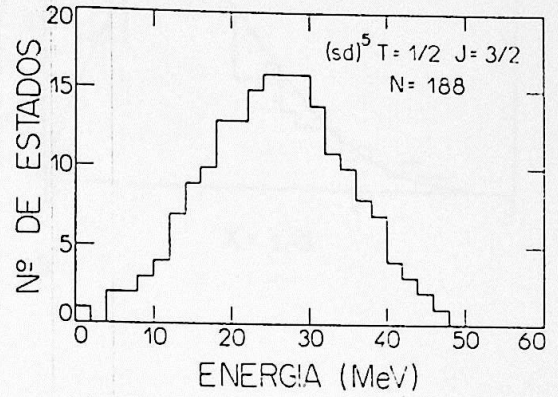
Tabela 4.4 Dimensões das configurações com 10 partículas de valência na camada sd

CONFIGURAÇÃO	INTERV. DE ENERGIA (MeV)	Nº DE ESTADOS	$\langle H \rangle_{OFF}$	λ	Q (%)
(sd) ² 2J= 1 2T= 1 N=109	0 - 10 10 - 15 15 - 20 20 - 25 25 - 30	8 13 19 21 23	0.633	0.51 1.64 2.40 2.66 2.91	45 35 22 17 16
(sd) ² 2J=3 2T=1 N=188	0-18.25 18.25-24.07 24.07-27.92 27.92-51.03	40 40 30 78	0.506	1.40 4.40 4.99 2.16	40 20 17 32
(sd) ² 2J=5 2T=1 N=223	0-16.88 16.88-21.62 21.62-25.06 25.06-50.14	40 40 30 113	0.405	1.52 5.40 5.57 2.88	42 22 17 29
(sd) ² 2J=1 2T=1 N=517	0 - 10 10 - 15 15 - 20 20 - 25 25 - 28.28	12 23 45 65 55	0.357	0.43 1.64 3.21 4.64 5.99	59 46 33 22 16
(sd) ² 2J=3 2T=1 N=923	0 - 10 10 - 15 15 - 20 20 - 25	11 29 61 99	0.264	0.29 1.53 1.11 5.23	62 46 35 24
(sd) ² 2J=5 2T=1 N=1142	0 - 10 10 - 15 15 - 22.8	16 38 146	0.231	0.37 1.75 4.32	63 50 34
(sd) ² 2J=4 2T=0 N=1206	0 - 10 10 - 15 15 - 20 20 - 26.9	7 20 45 128	0.251	0.17 1.00 2.26 4.66	70 57 47 33
(sd) ¹⁰ 2J=2 2T=0 N=1753	0 - 10 10 - 15 15 - 22.3	24 39 137	0.225	0.54 1.75 4.22	63 54 39
(sd) ¹⁰ 2J=2 2T=2 N=3011	0 - 10 10 - 15 15 - 17.3	46 95 59	0.161	0.74 3.06 4.08	67 51 44

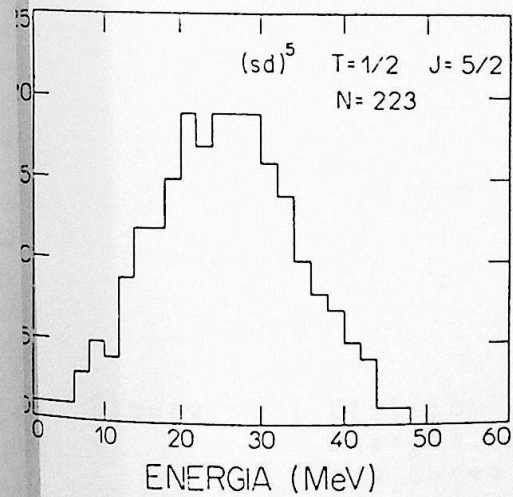
Tabela 4.5 características das configurações estudadas neste trabalho. A coluna $\langle H \rangle_{OFF}$ é o desvio médio quadrático dos elementos de matriz fora da diagonal.



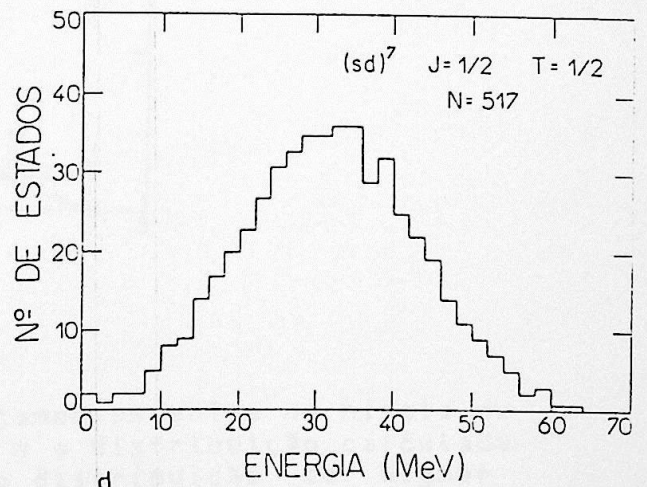
a



b



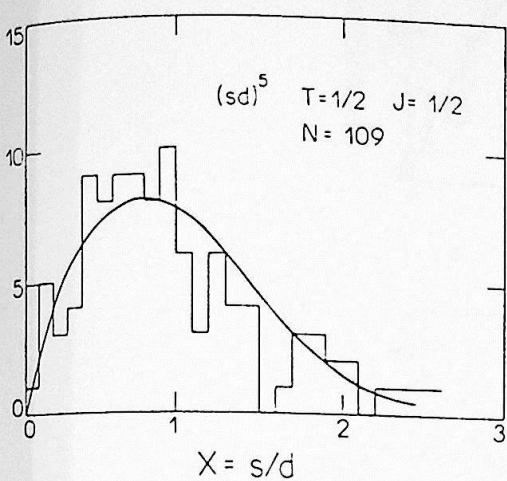
c



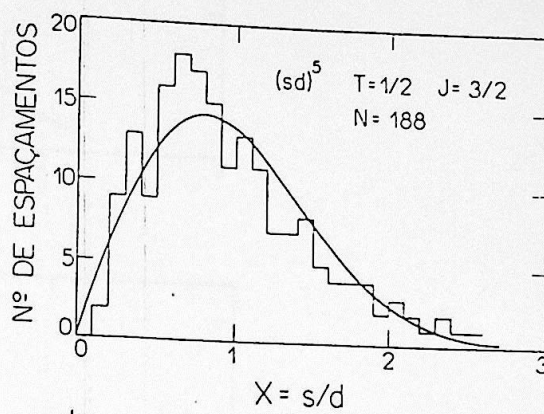
d

Figura 4.1: Densidade de estados

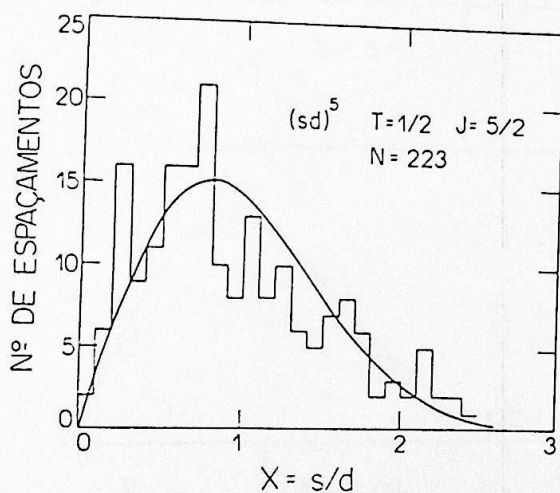
- | | | | |
|----|--------------------|---------|---------|
| a) | (s-d) ⁵ | T = 1/2 | J = 1/2 |
| b) | (s-d) ⁵ | T = 1/2 | J = 3/2 |
| c) | (s-d) ⁵ | T = 1/2 | J = 5/2 |
| d) | (s-d) ⁷ | T = 1/2 | J = 1/2 |



a



b



c

Figura 4.2: Distribuição dos espaçamentos entre os níveis de energia. O histograma é a distribuição calculada e a curva contínua é a distribuição de Wigner convenientemente modificada, eq 4.3.

- a) $(s-d)^5$ T = 1/2 J = 1/2
 b) $(s-d)^5$ T = 1/2 J = 3/2
 c) $(s-d)^5$ T = 1/2 J = 5/2

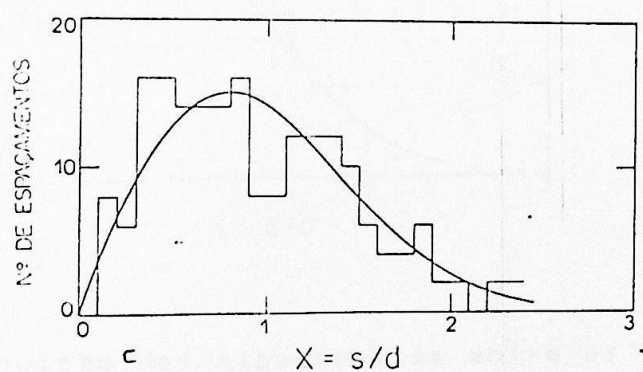
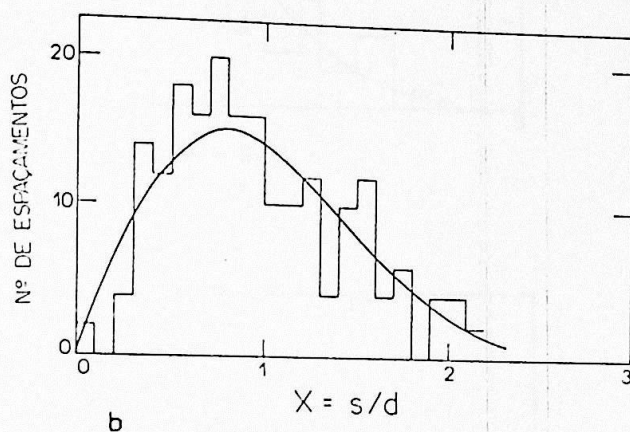
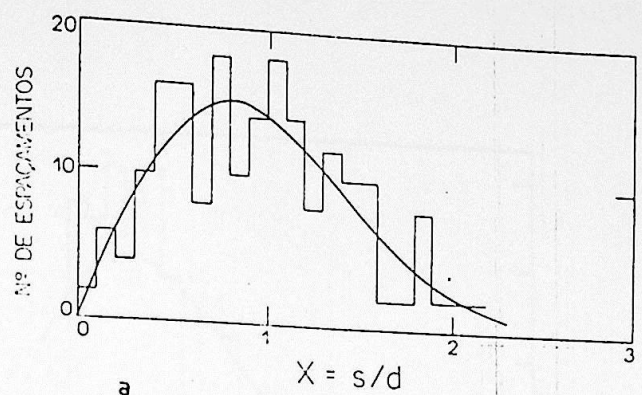


Figura 4.3: Distribuição dos espaçamentos entre os níveis de energia Ω histograma é a distribuição calculada e a curva contínua é a distribuição de Wigner convenientemente modificada, eq 4.3.

- a) $(s-d)^{\gamma}$ $T = 1/2$ $J = 1/2$
 b) $(s-d)^{\gamma}$ $T = 1/2$ $J = 3/2$
 c) $(s-d)^{\gamma}$ $T = 1/2$ $J = 5/2$

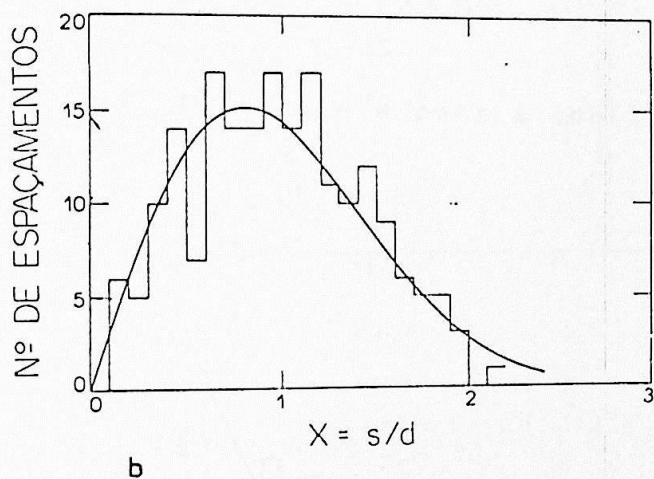
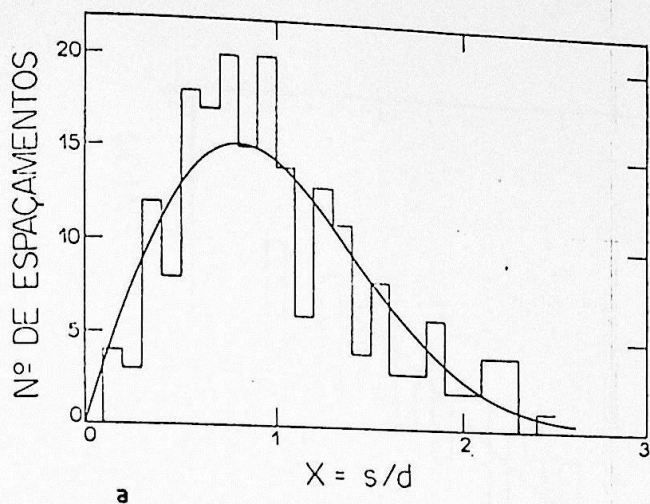


Figura 4.4: Distribuição dos espaçamentos entre os níveis de energia D histograma é a distribuição calculada e a curva contínua é a distribuição de Wigner convenientemente modificada, eq 4.3.

a) $(s-d)^{10} \quad T = 0 \quad J = 1$

b) $(s-d)^{10} \quad T = 1 \quad J = 1$

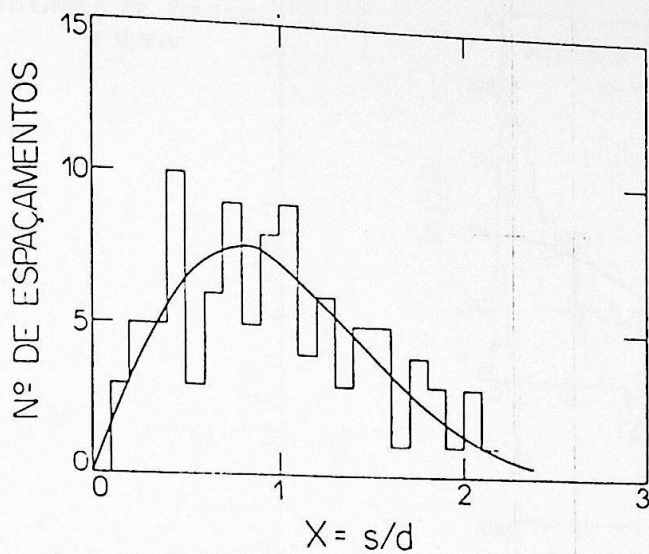


Figura 4.5: Idem à figura 4.4 para a configuração $(s-d)^*$
 $T \geq 0$ $J = 2$

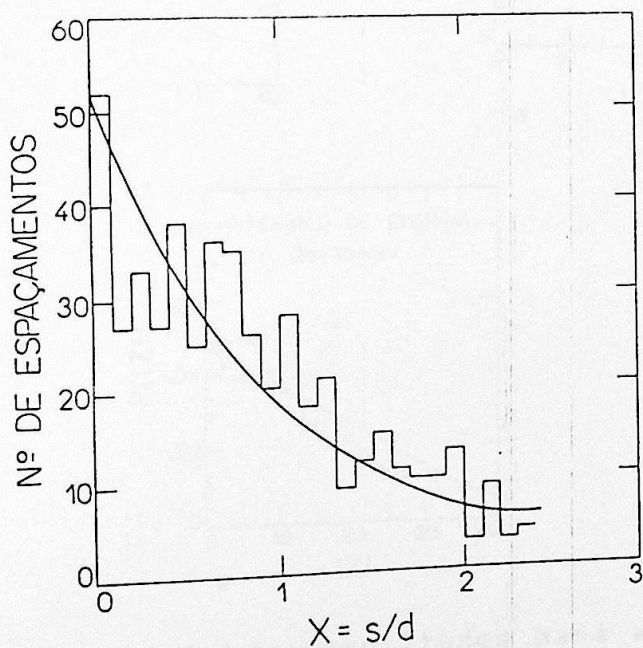


Figura 4.6: Distribuição dos espaçamentos entre os níveis de energia de uma sequência mista. O histograma é a distribuição calculada e a curva contínua é a distribuição de Poisson eq 4.12

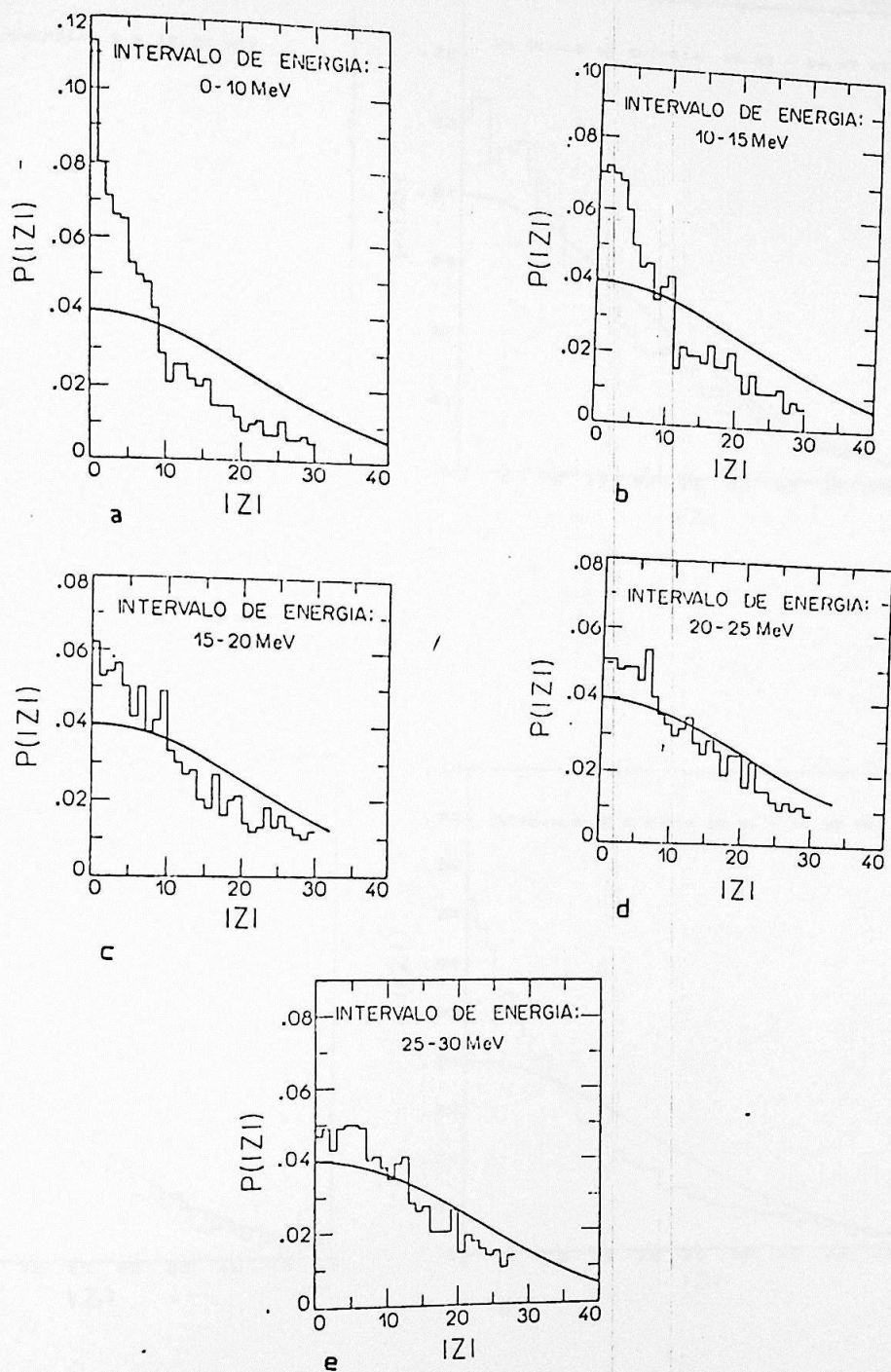


Figura 4.7: Distribuição das amplitudes para a configuração $(s-d)^2 J = 1/2 T = 1/2$. O histograma é a distribuição calculada, a curva contínua é a distribuição Gaussiana de Porter-Thomas, convenientemente modificada, eq 4.9

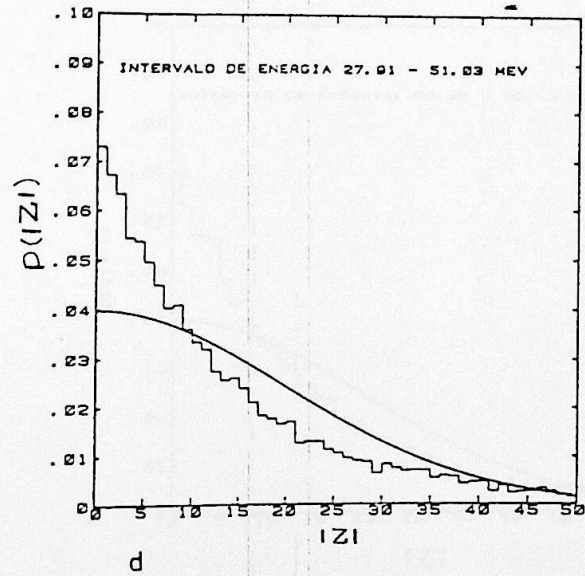
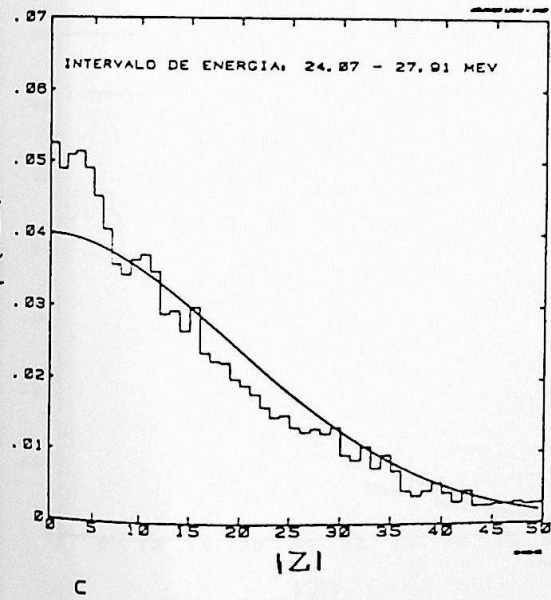
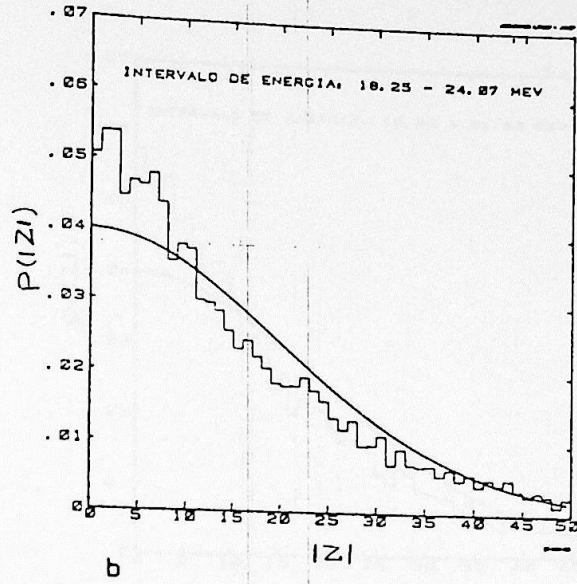
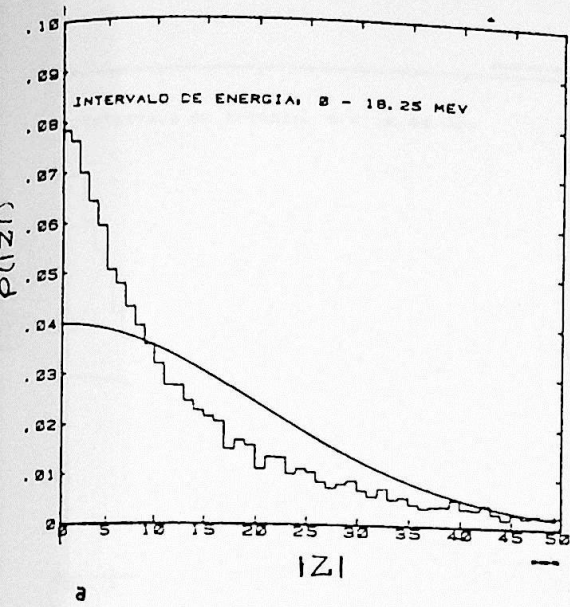


Figura 4.8: Idem à figura 4.7 para a configuração $(s-d)^2$
 $T = 1/2$ $J = 3/2$

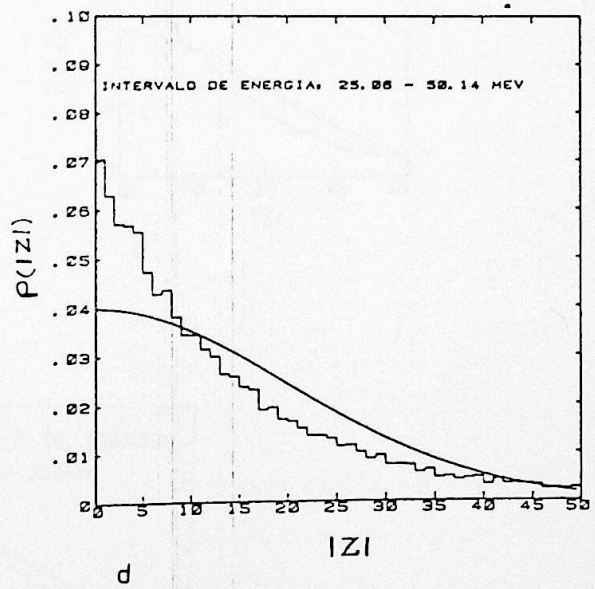
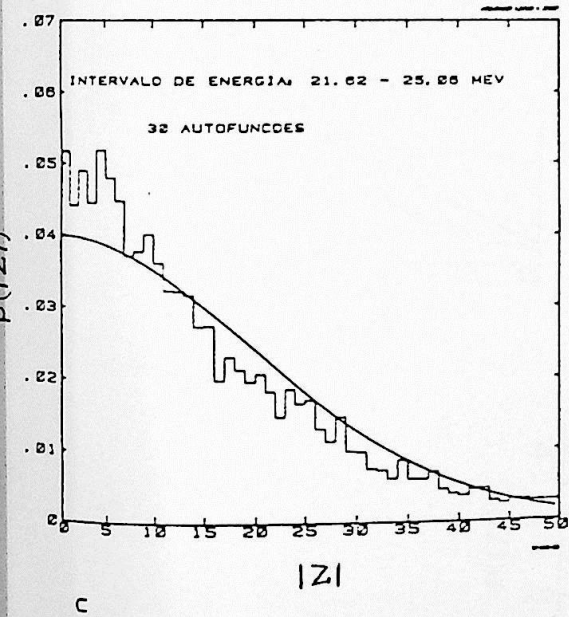
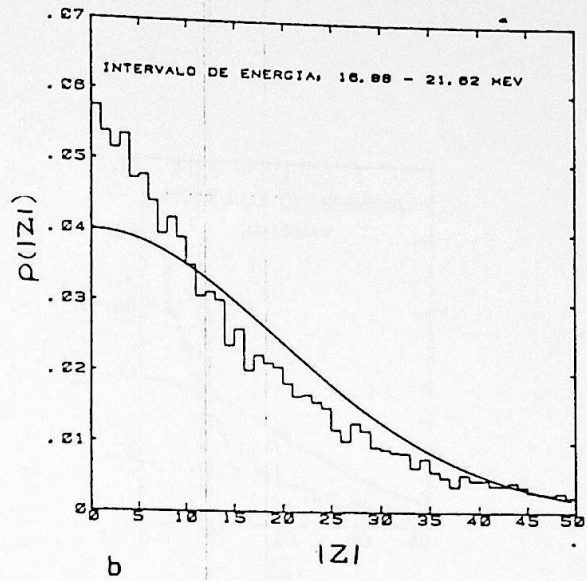
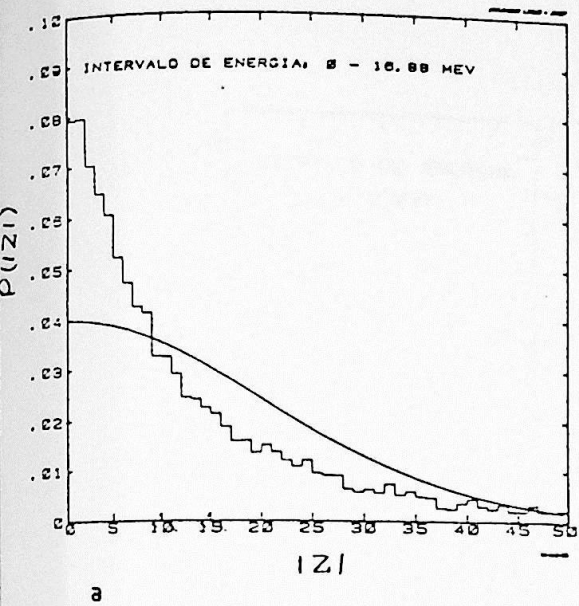


Figura 4.9: Idem à figura 4.7 para a configuração $(s-d)^2$
 $T = 1/2$ $J = 5/2$

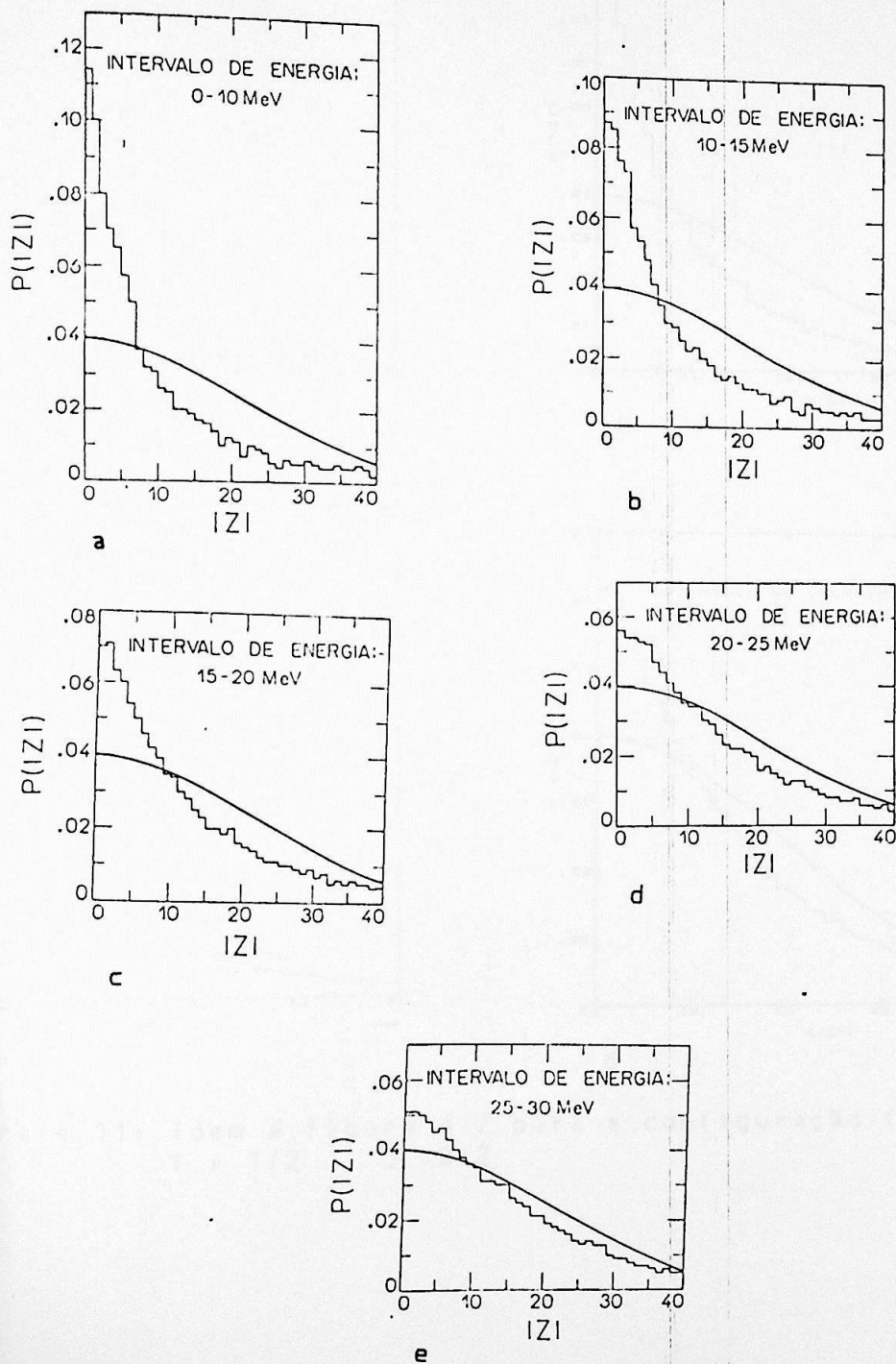
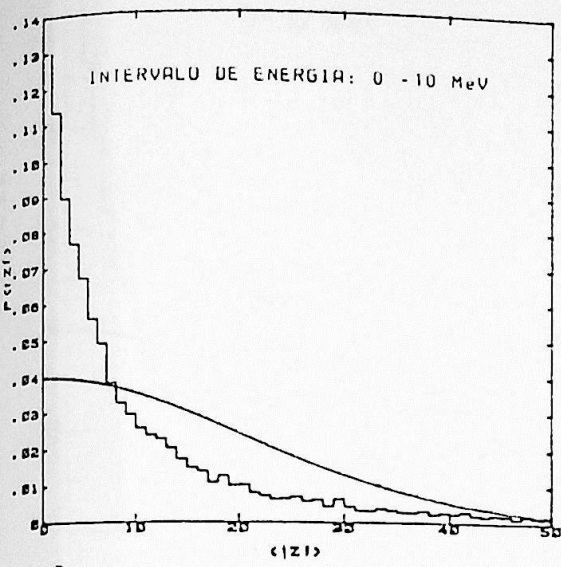
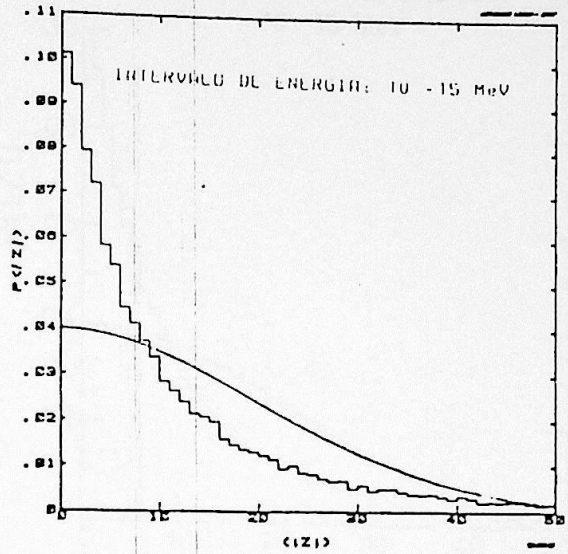


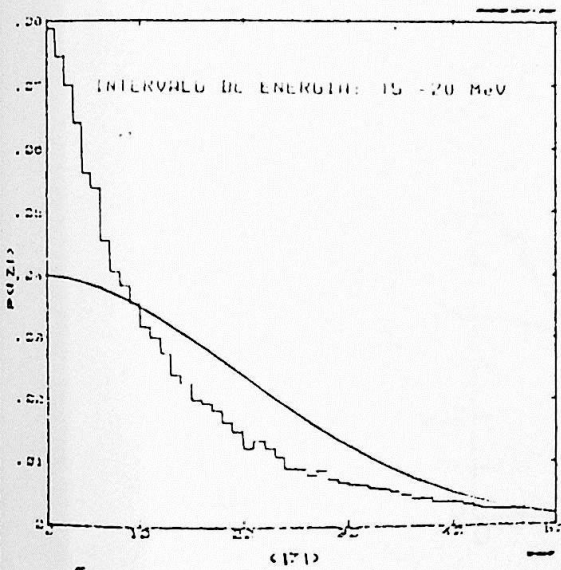
Figura 4.10: Idem à figura 4.7 para a configuração $(s-d)^2$
 $T = 1/2$ $J = 1/2$



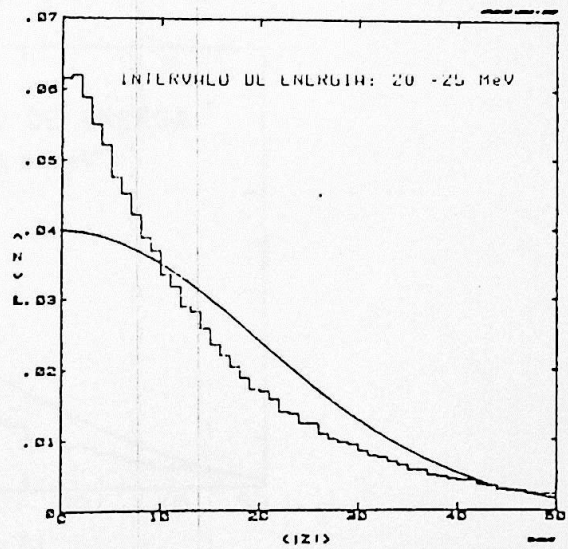
a



b



c



d

Figura 4.11: Idem à figura 4.7 para a configuração (s-d)
 $T = 1/2$ $J = 3/2$

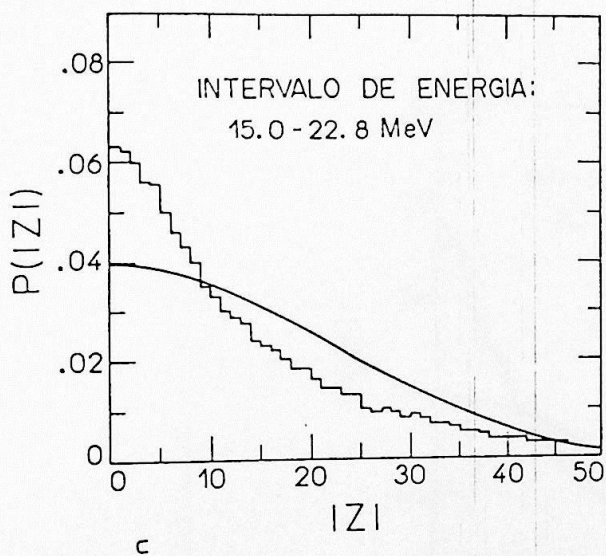
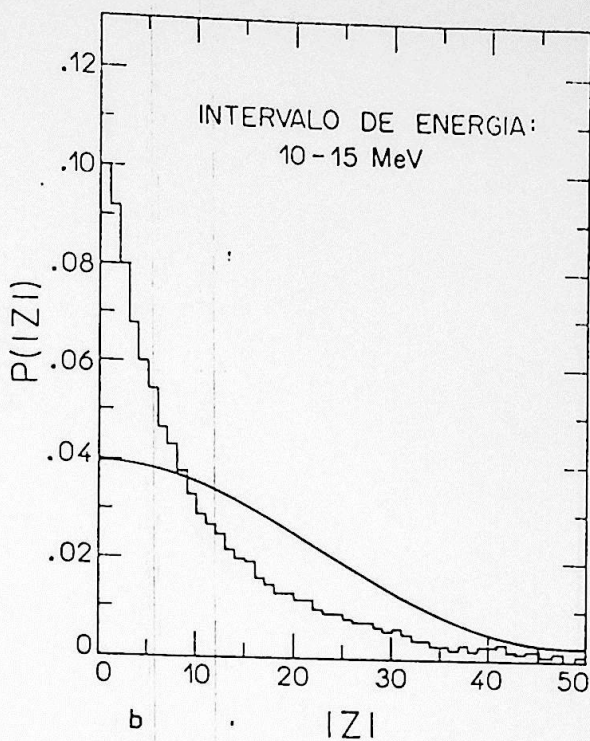
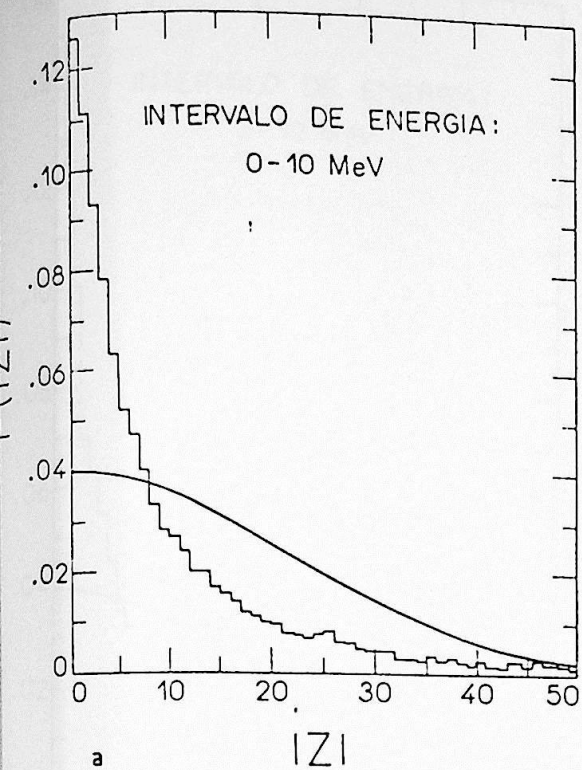


Figura 4.12: Idem à figura 4.7 para a configuração (s-d)
 $T = 1/2$ $J = 5/2$

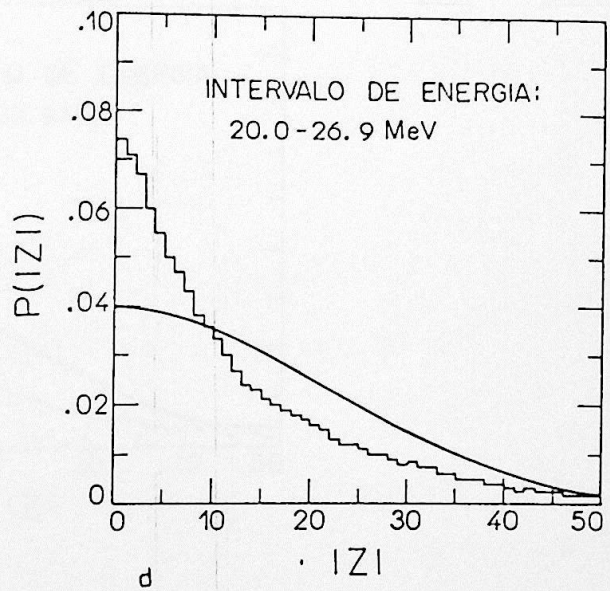
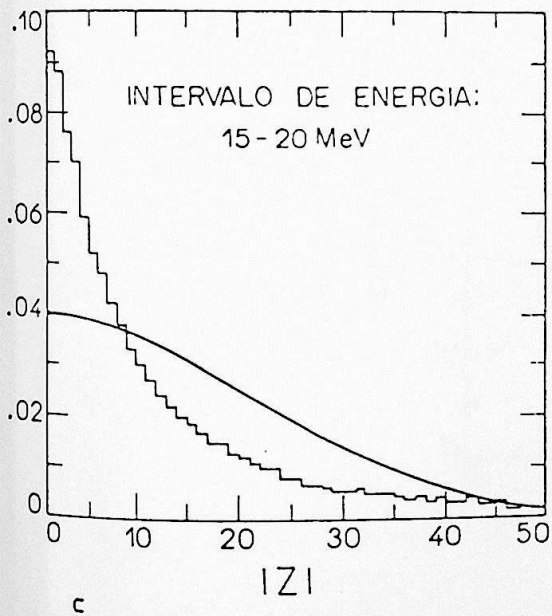
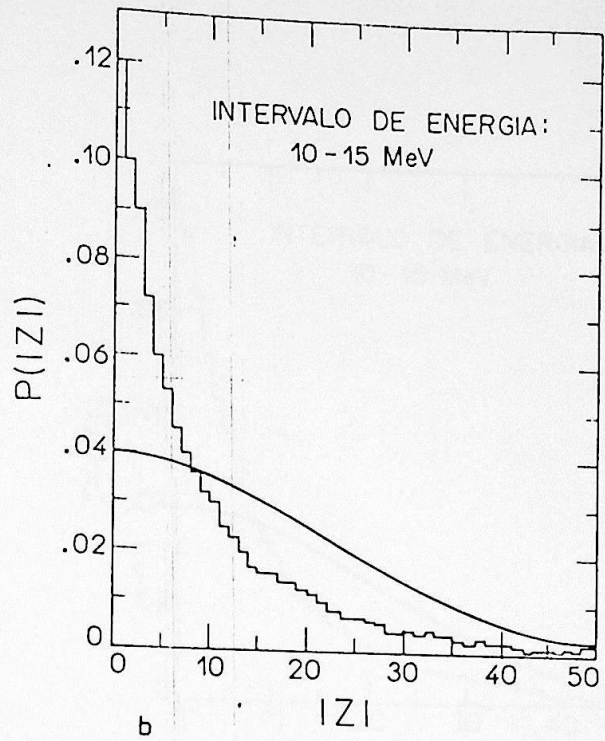
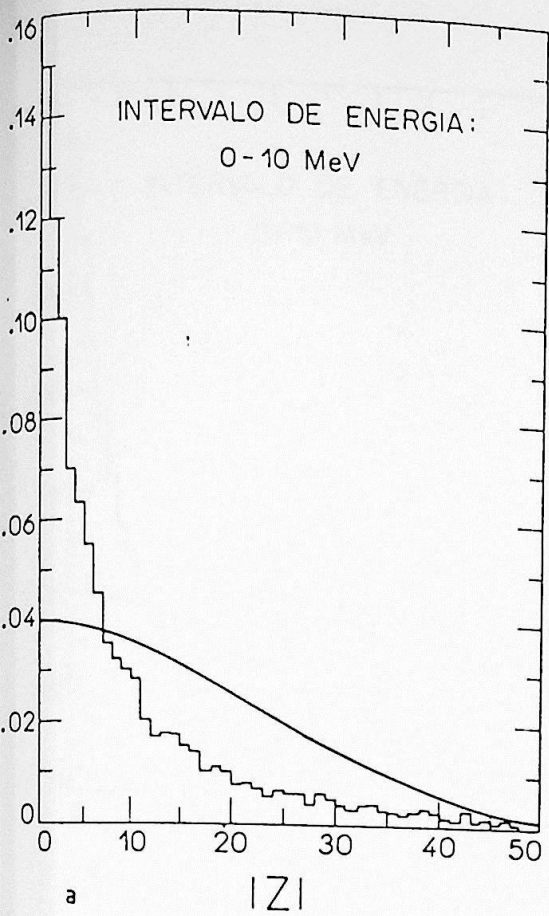


Figura 4.13: Idem à figura 4.7 para a configuração (s-d)^e
 $T = 0$ $J = 2$

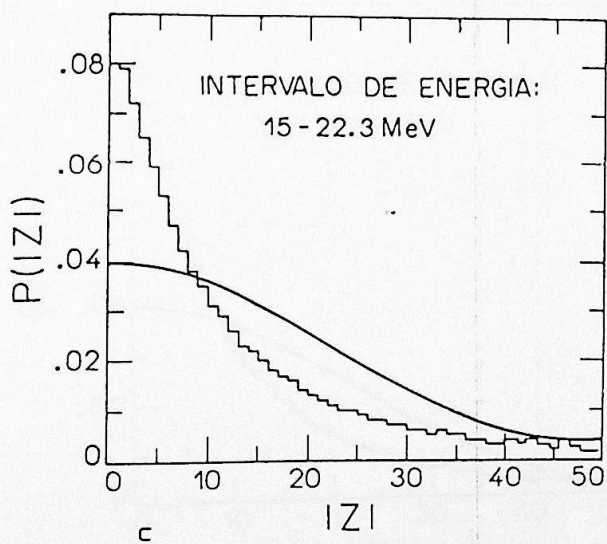
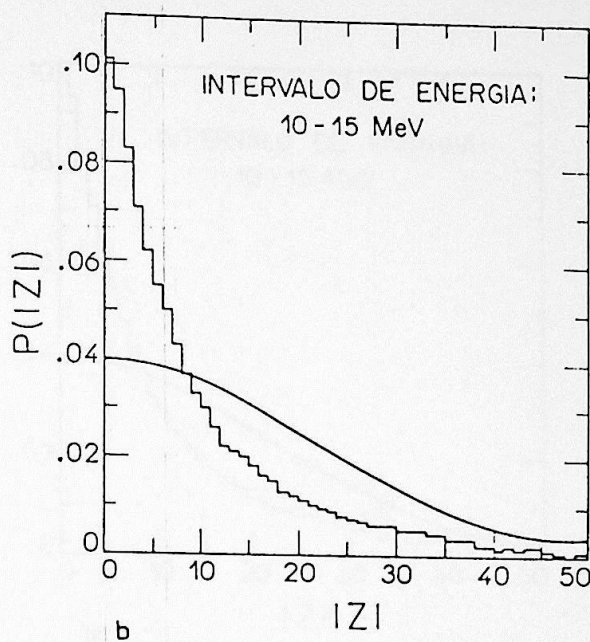
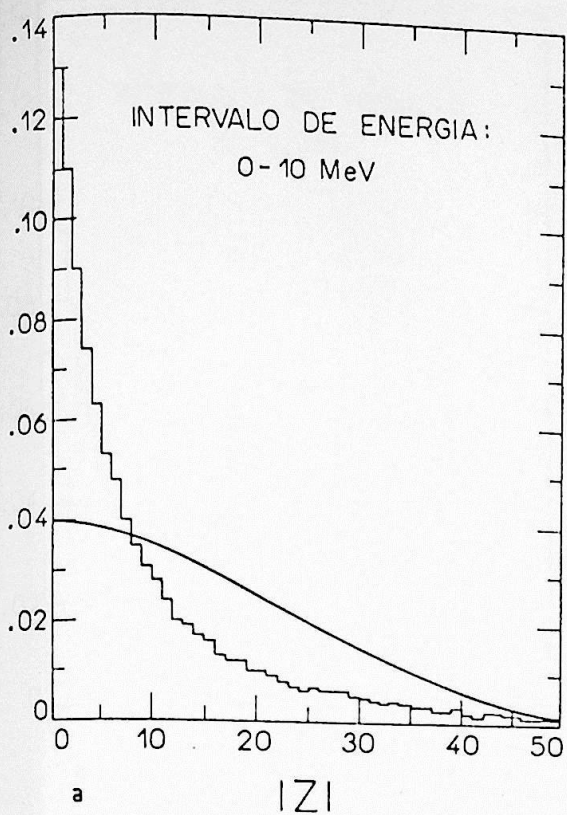


Figura 4.14: Idem à figura 4.7 para a configuração $(s-d)^{10}$
 $T = 0$ $J = 1$

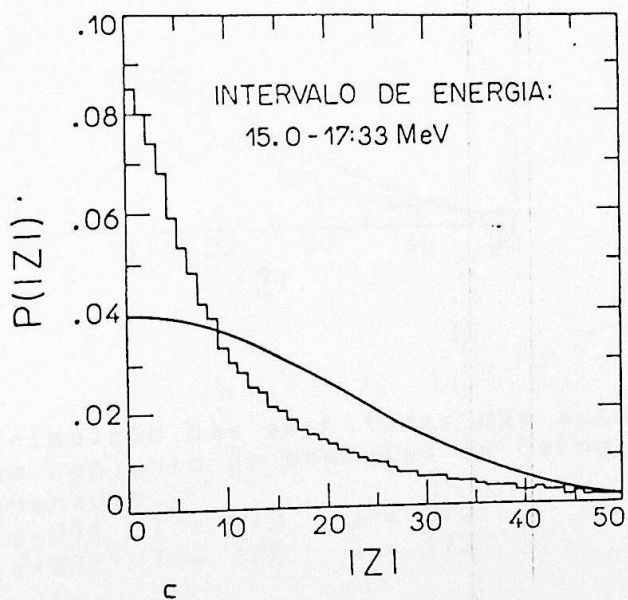
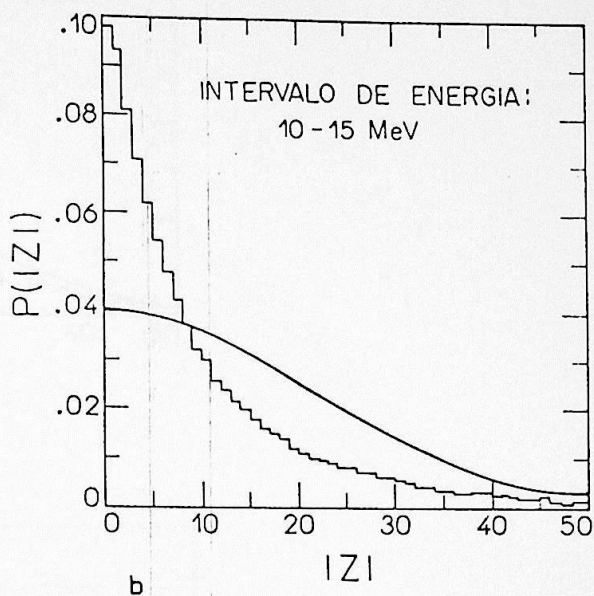
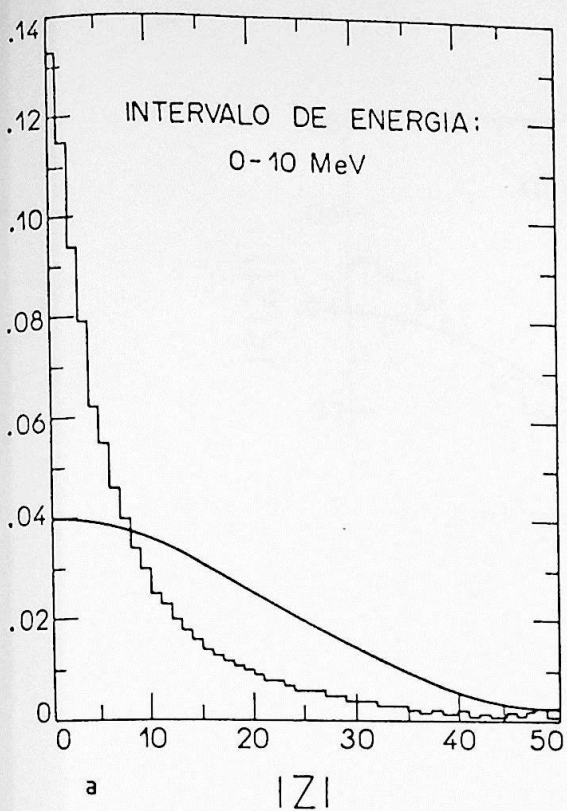


Figura 4.15: Idem à figura 4.7 para a configuração $(s-d)_{10}$
 $T = 1$ $J = 1$

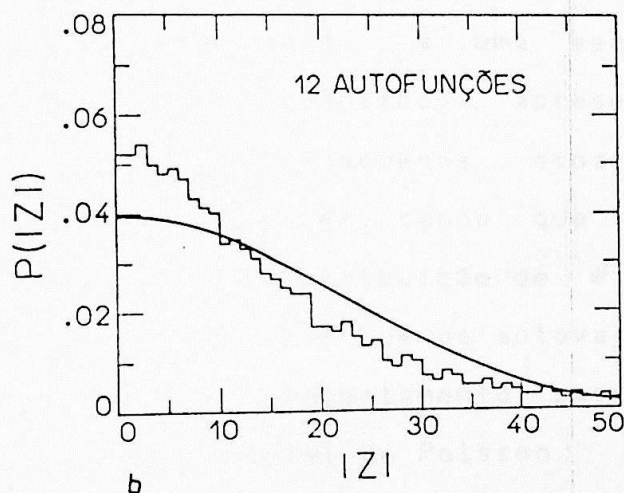
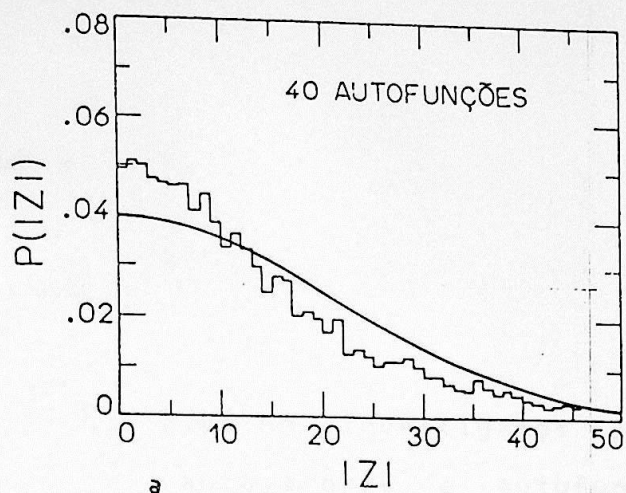


Figura 4.16: Distribuição das amplitudes das autofunções para um conjunto de energias de "single-particle" degeneradas.

a) $(s-d)^{\frac{5}{2}}$ $T = 1/2$ $J = 3/2$

b) $(s-d)^{\frac{7}{2}}$ $T = 1/2$ $J = 1/2$

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

Neste trabalho investigamos possíveis propriedades caóticas dos autovalores e autofunções provenientes de cálculos utilizando o modelo de camadas no espaço da camada sd. A análise de todos os casos estudados mostraram que os autovalores pertencentes a uma sequência com o mesmo conjunto de números quânticos, apresentam um comportamento caótico, isto é, pequenos espaçamentos têm baixa probabilidade de ocorrer, sendo que sua distribuição é bem caracterizada pela distribuição de Wigner. Somente no caso de uma sequência mista é que os autovalores mantêm uma certa regularidade e seu comportamento passa a ser descrito pela distribuição exponencial de Poisson.

Com respeito as autofunções, verificamos que a distribuição de suas amplitudes em função da energia de excitação apresenta o comportamento caótico somente no pico da densidade de níveis e que o critério utilizado por Brown e Bertsch ($\lambda > 1$) não é suficiente para testar a sua estatisticalidade. Verificamos ainda que o comportamento caótico é acentuado se considerarmos degenerescência nas energias de "single-particle".

O estudo sobre o comportamento caótico não está completamente fechado. Existe alguns pontos que podem ser explorados, como por exemplo verificar se a caoticidade está relacionada com determinados valores de J ou se um aumento

significativo de J aumenta esse comportamento caótico. Existe ainda uma perspectiva de poder simplificar os cálculos das larguras das ressonâncias gigantes considerando o comportamento caótico das autofunções.

REFERÊNCIAS

- 1 - C.E.Porter (ed) Statistical Theories of Spectra Academic Press, New York 1965
- 2 - M.L.Metha, Random Matrices and Statistical Theory of Energy Levels
- 3 - M. Carmeli, Statistical Theory and and Random Matrices, Marcel Dekker, Inc , New York 1983
- 4 - M.S.Hussein, Proceedings of the "Workshop on the Relations Between Reaction and Structure in Nuclear Physics" (ed. A.H.Feng, M.Vallieres and B.H.Wildenthal) World Scientific (1987) pg 138.
- 5 - B.A.Brown and G.F.Bertsch, Phy.Rev Lett 148B(1984)5
- 6 - P.J.Brusaard and P.W.M.Glaudemans, Shell-Model Applications in Nuclear Spectroscopy
- 7 - De Shalit and Talmi, Nuclear Shell Theory, Academic Press New York 1963
- 8 - Xiangdong Ji Phd.Thesis - Philadelphia - U.S.A 1987
- 9 - D. Zwarts Phd.Thesis - Utrecht - Holanda 1984
- 10 - J.B.French et al, Adv. in Nucl. Phys. 3(1969)193
- 11 -B.H.Wildenthal, Progress in Particle and Nuclear Physics vol 11, ed D. Wilkinson - Pergamon, Press, 1984
- 12- P.Roman , Advanced Quantum Theory, Addison-Wesley, Publishing Company, Inc 1964
- 13 - T.A.Brody et al Rev.Mod.Phys 53(1981)385

- 14 - R.R.Whitehead et al Phys.Lett. 76B(1978)149
- 15 - J.J.M Verbaaschot and P.J.Brusaard, Phys. Lett 87B
(1979)155
- 16 - C.E.Porter and Blumberg Phys.Rev 110(1958)786
- 17 - C.E.Porter and Rosenzweg, Phys.Rev 120(1960)1998
- 18 - J.B. French and S.S.M.Wong, Phys.Lett 33B(1970)449
- 19 - J.B.French and S.S.M. Wong, Phys.Lett 35B(1971)5
- 20 - O.Bohigas and J.Flores Phys.Lett 34B(1971)261
- 21 - M.Zirnbauer et al Nucl.Phys. A411(1983)161
- 22 - C.E.Porter and R.G.Thomas Phys.Rev 104(1965)483