UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

SBI-IFUSP
305M810T0519

EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA EXCITAÇÕES NUCLEARES PARTÍCULA-PARTÍCULA

ALFREDO PIO NORONHA RODRIGUES GALEÃO

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
519
INSTITUTO DE FÍSICA

Tese de doutoramento apresentada ao Instituto de Física da Universidade de São Paulo.

INSTITUTO DE FÍSICA-USP
BIBLIOTECA CENTRAL
REG.

SÃO PAULO
1980

A G R A D E C I M E N T O S

Ao professor Hsi-Tseng Chen, que propôs o assunto desta tese,

aos professores Francisco Krmpotić e Mahir Saleh Hussein pelos esclarecimentos,

aos colegas Maurício Porto Pato e Mauro Kyotoko pelas discussões,

ao pessoal do SEMA e do CCE pela assistência na execução dos programas de computador,

a Virgínia Gonçalves França, Rita Lavínia Torriani, Ivone Arruda Murro e Izabel Terue Yokomizo pelo trabalho de datilografia,

a Nancy Teresinha Morais pela confecção dos desenhos

e ao amigo Artur Guilherme Ratzat pela importante ajuda com os pormenores finais da tese.

A FAPESP financiou parte do tempo de computação no CCE.

R E S U M O

Desenvolvemos uma nova técnica de equações de movimento para excitações nucleares partícula-partícula. Para isso, foi estendido o formalismo de duplos-comutadores de Rowe, relaxando-se a condição de aniquilação do estado-pai, violada no presente caso. As equações foram testadas para estados com senioridade nula de 2, 4 e 6 partículas sujeitas a uma força de emparelhamento, estando os resultados em excelente concordância com a solução exata. Foram também calculados, usando-se as novas equações e uma hamiltoniana realística, os estados de baixa energia com $J^{\pi} = 0^{+}$, 2^{+}, 4^{+}, 6^{+} e 8^{+} para o ^{210,212,214}Pb e $J^{\pi} = 0^{+}$, 2^{+}, 4^{+} e 6^{+} para o ^{206,204,202}Pb. Tanto as energias de excitação como as taxas de transição (t,p) ou (p,t) para esses estados concordam bem com as obtidas por um cálculo convencional de modelo de camadas de McGrory e Kuo e com os dados experimentais. O formalismo deverá ser útil para a análise de reações de transferência de dois núcleons.

A B S T R A C T

A new equations-of-motion technique for particle-particle excitations in nuclei is developed. To this end Rowe's double-commutator formalism was extended, relaxing the condition of annihilation of the parent state, which is violated in the present case. The new equations were tested for seniority-zero states of 2, 4 and 6 particles interacting with a pairing force, and the results are in excellent agreement with the existing exact solutions. Also computed, using the new equations and a realistic Hamiltonian, were the low energy states with $J^{\pi} = 0^{+},2^{+},4^{+},6^{+}$ and 8^{+} in the case of ^{210,212,214}Pb, and $J^{\pi} = 0^{+},2^{+},4^{+}$ and 6^{+} in the case of ^{206,204,202}Pb. Both the excitation energies and the transition rates for the (t,p) or (p,t) reaction leading to those states are in as good an agreement with the experimental data as those obtained in a conventional shell-model calculation performed by McGrory and Kuo for some the above isotopes. The present formalism should be of interest for the analysis of two-nucleon transfer reactions.

Í N D I C E

CAPÍTULOS	PÁGINAS
I) Introdução Geral	1
II) Tensores Esféricos	9
II-1) Introdução	9
II-2) Tensores e Contratensores. Conjugação Covariante	12
II-3) Formas Multilineares	16
II-4) Acoplamento Tensorial	19
II-5) Notação Poligonal. Esquemas Conjugados	23
II-6) Reacoplamento	28
II-7) Formas Invariantes. Teorema de Wigner-Eckart	34
III) Técnicas Tensoriais no Formalismo de Segunda Quantização	37
III-1) Introdução	37
III-2) Operadores de Estado. Hamiltoniana	38
III-3) Símbolos de Anti-Simetrização	46
III-4) Comutadores Diretos	52
III-5) Comutadores Acoplados	55
III-6) Comutadores Especiais	58
III-7) Expressões Particulares	61
IV) Equações de Movimento	64
IV-1) Introdução	64
IV-2) Derivação Variacional de Equações de Movimento	65
IV-3) Método para a Solução de Equações de Movimento	69
IV-4) Equações de Movimento Tensoriais	74
IV-4.1) Estado-Pai com Ordem Tensorial Nula.	75

CAPÍTULOS PÁGINAS

IV-4.2) Estado-Pai com Ordem Tensorial Não - Nula 78

IV-5) Equações de Movimento para Excitações Partícula-Partícula 80

IV-5.1) Matriz-Métrica 85

IV-5.2) Matriz Principal 85

IV-5.3) Matriz de Correção 88

V) Estados com Senioridade Nula da Hamiltoniana de Emparelhamento 89

V-1) Introdução 89

V-2) Equações de Movimento para Vibrações de Emparelhamento 90

V-2.1) Matriz-Métrica 94

V-2.2) Matriz Principal 95

V-2.3) Matriz de Correção 96

V-3) Modelo Degenerado 96

V-4) Modelo de Dois Orbitais 104

V-5) ^{206,204,202}Pb com Emparelhamento 105

V-6) Comparação com a MTDA 106

VI) Cálculos de Equações de Movimento com uma Hamiltoniana Realística 112

VI-1) Introdução 112

VI-2) Matriz-Métrica para Estados com Senioridade Nula 113

VI-3) Matriz de Energia para Estados-Pai com Senioridade Nula 117

VI-4) Interação Efetiva de Kuo e Herling 119

VI-5) Aplicação ao ^{210,212,214}Pb 122

VI-6) Aplicação ao ^{206,204,202}Pb 124

VII) Conclusões 128

APÊNDICES PÁGINAS

A) Autovalores Relativos 132

A-1) Introdução 132

A-2) Operadores Positivos, Positivos-Definidos e Compatíveis 135

A-3) Autovalores em Relação a um Operador Positivo - Definido 137

A-4) Autovalores em Relação a um Operador Positivo . 138

B) Reações de Transferência de dois Núcleons 142

B-1) Introdução 142

B-2) Teoria DWBA 143

B-3) Potencial Ótico para Prótons 145

B-4) Potencial Ótico para o ^{3}H 146

C) Estados com Senioridade Nula 147

C-1) Introdução 147

C-2) Propriedades Úteis 148

C-3) Forma da Densidade de Duas Partículas 152

D) Cálculos Auxiliares 160

D-1) Introdução 160

D-2) Derivação da Equação (VI.27) 160

D-3) Derivação das Equações (VI.30) e (VI.31) 164

D-4) Derivação da Equação (C.50) 168

E) Tabelas 171

F) Figuras 187

REFERÊNCIAS 194

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO GERAL

Nesta tese é apresentada uma nova técnica de equações de movimento para excitações nucleares partícula - partícula. Dois testes numéricos deste método foram feitos: primeiro o aplicamos ao problema do emparelhamento sendo os resultados comparados com a sua solução exata e, em segundo lugar, realizamos cálculos numéricos para isótopos pares do chumbo com essas equações de movimento e uma interação efetiva realística e os comparamos com um cálculo convencional de modelo de camadas (mesma interação) e com os dados experimentais. Como se sabe, a intensidade aumentada das transições envolvendo a transferência de dois núcleons com $J^{\pi} = 0^{+}, 2^{+}, 4^{+}, \ldots$ entre o núcleo mágico ^{208}Pb e seus isótopos ^{210}Pb e ^{206}Pb sugere adotarem-se fônons de emparelhamento multipolar (BeB 71; Bro+74) para excitações elementares tendo por vácuo o estado fundamental do ^{208}Pb. Cada fônon carregaria isospin T=1, spin S=0 e número de transferência $\alpha = \pm 2$. Tomando emprestada essa linguagem, os estados para os quais desenvolvemos especificamente as equações de movimento corresponderiam àqueles com vários fônons de emparelhamento monopolar mais um único fônon de emparelhamento multipolar que lhe daria o momento angular e a paridade. No entanto, os efeitos anarmônicos são agora levados em conta, pois não é feita nenhuma aproximação de bosons. (A propósito, uma aplicação concreta do presente formalismo seria ao tratamento microscópico do emparelhamento multipolar). Procuramos seguir de perto o formalismo de duplos-comutadores de D.J.Rowe (Row 68; Row+75), mas, para o tratamento de excitações partícula-partícula, foi

necessário estendê-lo e refiná-lo consideravelmente. Isso porque o operador de aniquilação para uma excitação partícula-partícula aplicado ao estado-pai, que contém vários fônons de emparelhamento monopolar, não daria em geral um resultado nulo, como é invariavelmente suposto no método de Rowe. Os encorajadores resultados obtidos nos convenceram de que estamos na direção certa para o desenvolvimento de um instrumento útil para a análise de dados de reação (energias de excitação e seções de choque para transferência de dois núcleons) a partir de um cálculo de estrutura com uma hamiltoniana genérica, aplicável também em regiões de tabela periódica inacessíveis a cálculos com o modelo de camadas. Além disso, como o formalismo pode englobar o isospin, ele se presta também ao estudo de correlações próton-nêutron.

A simplicidade do formalismo que desenvolvemos deve-se ao uso de equações de movimento para operadores de excitação. Esse método tem recebido muita atenção e contribuído significativamente para o desenvolvimento da teoria nuclear de muitos corpos (KeK 63; DaK 64; Dre+67; BeZ 62; MYT 64; Mar+64).

Para um sistema complexo de muitos corpos como o núcleo, é inútil procurar resolver exatamente a equação de Schrödinger para sua função de onda. Uma saída seria tentaruma solução aproximada por algum método perturbativo como no modelo de camadas convencional, onde a hamiltoniana nuclear é diagonalizada num subespaço finito criteriosamente escolhido. Para uma descrição adequada, no entanto, é muitas vezes necessário um espaço da configurações enorme e a correspondente função de onda é extremamente complicada.

Entretanto, como freqüentemente ocorre na nature

za, surge algum aspecto simples mesmo num problema de tal complexidade. Assim, embora o estado fundamental do ^{208}Pb, por exemplo, seja, sem dúvida alguma, terrivelmente complicado, a evidência experimental é que os estados de baixa energia dos núcleos pares vizinhos sejam muito bem descritos pela simples adição ou remoção de dois núcleons àquele estado. Se estamos interessados nas propriedades dinâmicas desses núcleos, como energias de excitação e taxas de transição, podemos selecionar um formalismo que lide diretamente com operadores de excitação, no caso acima os operadores de transferência de dois núcleons. É o que faz o método das equações de movimento. A idéia básica é que, em casos como esse, as funções de onda, ainda que extremamente complicadas, não devem diferir muito entre si, devendo haver um operador simples que transforme uma na outra. Transfere-se, então, a ênfase de quantidades absolutas, como funções de onda e energias de ligação, para grandezas relativas diretamente acessíveis à medida, como taxas de transição e energias de excitação. Portanto, embora o núcleo seja extremamente complicado, podemos abordá-lo otimizando os seus aspectos mais simples e significativos.

Historicamente, as primeiras aplicações da técnica das equações de movimento foram a derivação, particularmente simples e compacta, das equações de Hartree-Fock e Hartree-Bogoliubov (And 58; Val 61) e da aproximação da fase aleatória ou RPA (Saw 57; Bar 60; Saw 61). A RPA é a teoria mais simples para estados nucleares excitados e tem sido amplamente usada no cálculo de excitações coletivas vibracionais, como as vibrações quadripolares e octopolares de energia baixa e a ressonância dipolar gigante.

As equações de movimento usadas no RPA são uma ge

neralização das bem conhecidas equações satisfeitas pelos operadores de boson do oscilador harmônico com sua hamiltoniana. Em outras palavras, escreve-se

$$[H, O_\lambda^\dagger] = \omega_\lambda O_\lambda^\dagger \quad \text{e} \quad [H; O_\lambda] = -\omega_\lambda O_\lambda \quad , \qquad \text{(I.1)}$$

onde H é a hamiltoniana e O_λ^+ são os operadores de excitação procurados, que ligariam os estados excitados $|\lambda\rangle$ a algum estado pai $|\phi\rangle$ conforme as equações:

$$O_\lambda^\dagger |\phi\rangle = |\lambda\rangle \quad \text{e} \quad O_\lambda |\phi\rangle = 0 \, . \qquad \text{(I.2)}$$

Acontece que, para sistemas de muitos corpos, (I.1) não tem soluções simples pois, devido à interação de dois corpos, os dois membros teriam estruturas diferentes em segunda quantização. Para contornar essa dificuldade a equação é linearizada de alguma forma, o que, apesar do sucesso obtido, tem a desvantagem de deixar obscuras as aproximações envolvidas.

Entre diversos outros progressos no desenvolvimento das técnicas de equações de movimento, está a introdução do formalismo de duplos-comutadores feita por D.J.Rowe (Row68). Além de ter o mérito de ser simples tanto do ponto de vista formal como computacional, ele remove a arbitrariedade dos processos de linearização dos métodos anteriores, que restringiam o seu uso a sistemas relativamente simples. O novo método foi testado em diversos casos exatamente solúveis, provando ser, além de tratável, surpreendentemente preciso (PaR 68; UlR 69) e foi usado para estender o RPA a núcleos com camadas abertas (RoW 70).

Na abordagem de Rowe, as equações de movimento não

envolvem os operadores diretamente, como (I.1) para o RPA, mas através de valores-de-espera no estado-pai. Assim, os operadores de excitação em (I.2) satisfazem, segundo Rowe, as equações de movimento fomalmente exatas:

$$\langle\phi|[\mathcal{O}_\kappa, H, \mathcal{O}_\lambda^\dagger]_\pm|\phi\rangle = \omega_\lambda \langle\phi|[\mathcal{O}_\kappa, \mathcal{O}_\lambda^\dagger]_\pm|\phi\rangle = \omega_\lambda \delta_{\kappa\lambda} \quad , \tag{I.3}$$

onde o duplo-comutador (-) ou duplo-anticomutador(+) é definido por

$$[\mathcal{O}_\kappa, H, \mathcal{O}_\lambda^\dagger]_\pm = \frac{1}{2}[\mathcal{O}_\kappa,[H,\mathcal{O}_\lambda^\dagger]]_\pm + \frac{1}{2}[[\mathcal{O}_\kappa,H],\mathcal{O}_\lambda^\dagger]_\pm \quad . \tag{I.4}$$

Já que o formalismo de Rowe é tão simples e funcionou bem em tantos casos é muito tentador tentar aplicá - lo também aos estados populados em reações de transferência de dois núcleons. Isso seria de grande utilidade para a análise dessas reações, especialmente em regiões da tabela periódica onde cálculos de modelo de camadas são impraticáveis. Para atacar esse problema, tomamos os operadores de transferência de dois núcleons para operadores de excitação e o estado fundamental do núcleo alvo para estado-pai. Surge, no entanto, um problema com a segunda das equações (I.2), a condição de aniquilação do estado-pai imposta por Rowe, que seria frequëntemente violada em problemas do presente tipo como já mencionamos acima. Era, portanto, necessário generalizar o formalismo e uma importante contribuição do presente trabalho é tê-lo feito, relaxando aquela condição e tornando-o aplicável a uma gama ainda mais ampla de problemas, incluindo as excitações partícula-partícula.

Sem entrar em detalhes, a forma final das equações aqui derivadas é

$$\langle\phi|[\mathcal{O}_\kappa, H, \mathcal{O}^\dagger_\lambda]_\pm|\phi\rangle \pm \langle\phi|\mathcal{O}^\dagger_\lambda H \mathcal{O}_\kappa|\phi\rangle = \omega_\lambda\left(\langle\phi|[\mathcal{O}_\kappa, \mathcal{O}^\dagger_\lambda]_\pm|\phi\rangle \mp \langle\phi|\mathcal{O}^\dagger_\lambda \mathcal{O}_\kappa|\phi\rangle\right) , \tag{I.5}$$

onde as escrevemos de modo a contrastá-las com as de Rowe. Não se espera resolver estas equações exatamente, é claro, e por isso elas foram derivadas de modo a facilitar a introdução de boas aproximações. Para o caso específico dos cálculos com os isótopos do chumbo aqui feitos, poderíamos, por exemplo, tirar vantagem do fato de as correlações de emparelhamento serem dominantes nos estados fundamentais de núcleos par-par e escolher para funções de onda dos estados-pai as soluções da hamiltoniana esquemática de emparelhamento. Não é este o caminho que seguimos, no entanto, tendo preferido obter o estado fundamental do ^{210}Pb e do ^{206}Pb a partir daquele do ^{208}Pb —— o vácuo —— por um cálculo convencional de modelo de camadas com a própria hamiltoniana realística. A partir daí obtivemos os estados fundamentais do ^{212}Pb e do ^{204}Pb usando a própria equação de movimento (I.5) e assim por diante até chegarmos ao estado-pai desejado. Feito isso, alcançamos os estados de interesse com $J^\pi = 0^+, 2^+, 4^+, \ldots$ no núcleo seguinte por meio dos correspondentes operadores de excitação obtidos resolvendo a equação (I.5).

Nos cálculos numéricos que fizemos com a hamiltoniana esquemática de emparelhamento ficou comprovado, pela comparação com a solução exata, que nossas equações de movimento se saíram surpreendentemente bem, apesar de sua simplicidade. Outros cálculos igualmente simples, mas que fazem alguma aproximação bosônica como o MTDA (GoN 70; GhG 72), nem sempre são tão bem sucedidos e as razões para isso foram aqui elucidadas.

Calculamos em seguida, usando uma hamiltoniana realística, os estados com $J^{\pi} = 0^+,2^+,4^+,6^+$ e 8^+ para o $^{210,212,214}Pb$ e com $J^{\pi} = 0^+,2^+,4^+$ e 6^+ para o $^{206,204,202}Pb$. Tanto as energias como as taxas de transição (t,p) ou (p,t) envolvendo os estados menos excitados concordam tão bem com os dados experimentais quanto as obtidas no cálculo convencional de modelo de camadas feito por McGrory e Kuo (McK 75). Convém chamar a atenção para a simplicidade do presente método. Assim, enquanto os operadores de excitação que usamos têm tipicamente uma ou duas dezenas de componentes, os correspondentes cálculos de modelo de camadas podem envolver centenas ou milhares de configurações. No entanto, pelo menos para os estados de mais baixa energia para cada valor de J, os resultados são de igual qualidade.

No capítulo II apresentamos uma técnica conveniente para o tratamento da álgebra do momento angular e isospin, semelhante à de J.B.French (Fre 66; Fre+69) mas com um enfoque mais geral, sendo o acoplamento tensorial abordado em termos de formas multilineares. Essa técnica é utilizada, no capítulo III, no cálculo dos comutadores e duplos-comutadores necessários para as equações desta tese. No capítulo IV derivamos variacionalmente as novas equações de movimento, apropriadas para excitações partícula-partícula. Estas são particularizadas para vibrações de emparelhamento no capítulo V, onde também relatamos alguns cálculos numéricos e discutimos a teoria MTDA (GoN 70; GhG 72). No capítulo VI apresentamos os resultados dos cálculos que efetuamos para isótopos pares do chumbo usando nossas equações e uma interação realística. Foram obtidas tanto energias como taxas de transições (p,t) ou (t,p). As conclusões estão agrupadas no capítulo VII. A solução das equações de

movimento leva sempre a um problema de autovalores relativos e, por isso, suas principais propriedades são apresentadas no apêndice A. Uma revisão sumária da teoria DWBA para reações de transferência de dois núcleons é feita no apêndice B, onde são também indicados os parâmetros que usamos nos cálculos para reações (p,t) e (t,p). Nas aplicações feitas nesta tese, o estado-pai sempre tem senioridade nula, gozando de certas propriedades úteis que foram deduzidas no apêndice C. Finalmente, alguns cálculos mais longos são apresentados no apêndice D. As tabelas estão todas incluídas no apêndice E e as figuras no apêndice F. As referências são indicadas, entre parênteses, por meio de três letras retiradas dos nomes dos autores e dois algarismos indicando o ano da publicação. Os dados bibliográficos completos estão listados nas páginas finais.

CAPÍTULO II

TENSORES ESFÉRICOS

II-1) INTRODUÇÃO

Apresentamos, neste capítulo, técnicas para a manipulação de tensores, semelhantes às de J.B. French (Fre 66; Fre + 69), particularmente úteis no formalismo de segunda quantização para sistemas de muitos corpos, quando se trabalha com produtos de muitos tensores que não comutam entre si, como será o caso nesta tese. Evitaremos deduções, pois elas decorrem facilmente de resultados elementares da álgebra do momento angular, que suporemos conhecidos (ver, por exemplo, (Mes 66, c. XIII)). O ponto central de nossa abordagem consiste em tratar do acoplamento tensorial em termos de formas multilineares que, além do produto, englobam comutadores, anticomutadores, contrações, elementos de matriz, etc.

Sendo a hamiltoniana invariante por rotações, os estados estacionários podem ser escolhidos entre os auto-estados do quadrado do momento angular e de sua componente z. Tais estados, denotados por $|jm\rangle$, com j inteiro ou semi-inteiro e $m = j, j-1, \ldots, -j$, satisfazem as seguintes relações:

$$J^2 |jm\rangle = j(j+1) |jm\rangle \,, \tag{II.1}$$

$$J_z |jm\rangle = m |jm\rangle \tag{II.2}$$

e

$$J_\pm |jm\rangle = \sqrt{j(j+1) - m(m\pm1)}\ |j\, m\pm1\rangle, \tag{II.3}$$

numa notação já padronizada.

Correspondendo à rotação $\mathcal{R}(\omega)$, caracterizada pelo conjunto de parâmetros ω (por exemplo: os três ângulos de Euler), existe um operador unitário $R(\omega)$ no espaço de Hilbert, tal que, para qualquer vetor $|\psi\rangle$ desse espaço,

$$\mathcal{R}(\omega)\{|\psi\rangle\} = R(\omega)\,|\psi\rangle \tag{II.4}$$

e

$$\mathcal{R}(\omega)\{\langle\psi|\} = \langle\psi|\,R^{\dagger}(\omega)\,, \tag{II.4'}$$

onde $\mathcal{R}(\omega)\{\cdot\}$ denota a transformada pela rotação $\mathcal{R}(\omega)$. Para estados que satisfazem as relações (II.1-3) tem-se

$$\mathcal{R}(\omega)\{|jm\rangle\} = \sum_{m'=j}^{-j} |jm'\rangle\, D^{(j)}_{m'm}(\omega) \tag{II.5}$$

e, se os mesmos são normalizados,

$$D^{(j)}_{m'm}(\omega) = \langle jm'|R(\omega)|jm\rangle\,. \tag{II.6}$$

A matriz de rotação $D^{(j)}_{m'm}(\omega)$ é unitária, depende apenas de ω e satisfaz a seguinte propriedade de conjugação (ShT 63, p. 513)

$$D^{(j)}_{m'm}(\omega)^{*} = (-)^{m'-m} D^{(j)}_{-m'-m}(\omega)\,. \tag{II.7}$$

A transformada por rotação de um operador é definida por

$$\mathcal{R}(\omega)\{\mathcal{O}\} = R(\omega)\,\mathcal{O}\,R^{+}(\omega)\,; \qquad \text{(II.8)}$$

Ocorrem frequentemente conjuntos de operadores $\mathcal{O}^{k}_{m}$, com $m = k, k-1, \ldots, -k$, tais que

$$\mathcal{R}(\omega)\{\mathcal{O}^{k}_{m}\} = \sum_{m'=k}^{-k} \mathcal{O}^{k}_{m'}\, D^{(k)}_{m'm}(\omega)\,. \qquad \text{(II.9)}$$

Sendo $f(\vec{r})$ uma função complexa do ponto, sua transformada por rotação é dada por

$$\mathcal{R}(\omega)\{f(\vec{r})\} = f(\vec{r}')\,, \qquad \text{(II.10)}$$

onde os vetores-posição $\vec{r}'$ e $\vec{r}$ se referem ao mesmo ponto, com $\vec{r}'$ expresso em termos do sistema de eixos girado de $\mathcal{R}(\omega)$ em relação ao original. No caso particular dos harmônicos esféricos, temos

$$\mathcal{R}(\omega)\{Y_{\ell m}(\theta,\varphi)\} = Y_{\ell m}(\theta',\varphi') = \sum_{m'=\ell}^{-\ell} Y_{\ell m'}(\theta,\varphi)\, D^{(\ell)}_{m'm}(\omega)\,. \qquad \text{(II.11)}$$

As grandezas $|jm\rangle$, $\mathcal{O}^{k}_{m}$ e $Y_{\ell m}$ são de natureza matemática distinta, mas todas elas se transforman por rotações de modo análogo, como se vê nas equações (II.5), (II.9) e (II.11). A razão é que cada uma delas é uma componente padrão de um tensor esférico. Tais grandezas, às quais nos referiremos a seguir simplesmente como tensores, tiveram sua álgebra estudada, entre outros, por G. Racah e os resultados essenciais encontram-se na monografia (FRa 59).

As matrizes $D^{(j)}_{m'm}(\omega)$ são as representações unitá-

rias irredutíveis do grupo de rotações, ou melhor, do grupo SU(2). Ora, devido à interação forte ser a mesma para nêutrons e prótons, a hamiltoniana nuclear (excluída a interação coulombiana) é invariante por transformações análogas às rotações com o isospin desempenhando o papel de momento angular. Tais transformações (rotações no espaço de cargas) formam um grupo isomorfo a SU(2), tendo, portanto, as mesmas representações irredutíveis. Isso nos permite definir tensores em relação a rotações no espaço de cargas por equações análogas a (II.5),(II.9) e (II.11). No que segue, rotações e tensores devem ser entendidos em ambos os sentidos.

Na seção II-2 definimos tensores e contratensores, bem como uma modificação da conjugação hermitiana apropriada para tais grandezas. Na seção II-3, apresentamos as formas multilineares e, com sua ajuda, estudamos o acoplamento tensorial na seção II-4. Para facilitar a escrita de fórmulas envolvendo acoplamentos tensoriais, introduzimos, na seção II-5, uma notação poligonal inspirada na de J.B. French (Fre 66). Ela é, então, usada nas fórmulas de reacoplamento da seção II-6. Finalmente, como grande parte da vantagem em trabalhar com tensores advém das propriedades das formas invariantes, elas são discutidas na seção II-7.

II-2) TENSORES E CONTRATENSORES. CONJUGAÇÃO COVARIANTE

Notemos inicialmente que, seja qual for a natureza da grandeza T, suas transformadas por rotações satisfazem sempre as seguintes propriedades:

$$\mathcal{R}(\omega_2)\{\mathcal{R}(\omega_1)\{T\}\} = \mathcal{R}(\omega_{21})\{T\}\,, \tag{II.12}$$

$$\mathcal{R}(\omega)\{c_1 T_1 + c_2 T_2\} = c_1\,\mathcal{R}(\omega)\{T_1\} + c_2\,\mathcal{R}(\omega)\{T_2\} \tag{II.13}$$

e

$$\mathcal{R}(\omega)\{T^{\dagger}\} = \left(\mathcal{R}(\omega)\{T\}\right)^{\dagger}, \tag{II.14}$$

onde $\mathcal{R}(\omega_{21}) = \mathcal{R}(\omega_2)\mathcal{R}(\omega_1)$, c_1 e c_2 são números complexos quaisquer e a conjugação hermitiana indicada por "†" deve ser entendida no sentido genérico de (Mes 66, p.255). Essas propriedades podem ser verificadas em todos os casos particulares tratados na seção anterior, a saber: (II.4,4'), (II.8) e (II.10).

Feito isso, passemos a algumas definições:

DEFINIÇÃO 1 - O conjunto de grandezas $T^{\lambda}_{\hat{\lambda}}$, com λ inteiro ou semi-inteiro e $\hat{\lambda} = \lambda, \lambda-1, \ldots -\lambda$, é um <u>tensor de ordem λ</u>, se elas se transformam por rotações segundo a igualdade:

$$\mathcal{R}(\omega)\{T^{\lambda}_{\hat{\lambda}}\} = \sum_{\hat{\lambda}'} T^{\lambda}_{\hat{\lambda}'}\, D^{(\lambda)}_{\hat{\lambda}',\hat{\lambda}}(\omega)\,. \tag{II.15}$$

A ordem tensorial é indicada por qualquer letra grega ou romana (por exemplo: λ) colocada como um índice superior. Para especificar a componente usamos, como índice inferior, a mesma letra com um circunflexo (por exemplo: $\hat{\lambda}$). Se nos quizermos referir à totalidade do tensor e não a uma particular componente, omitiremos o índice inferior (por exemplo: T^{λ}).

DEFINIÇÃO 2 - O conjunto de grandezas $T^{\bar{\lambda}}_{\hat{\lambda}}$, com λ inteiro ou semi-inteiro e $\hat{\lambda} = \lambda, \lambda-1, \ldots -\lambda$, é um <u>contratensor de ordem λ</u>, se elas se transformam por rotações segundo a iqualdade:

$$\mathcal{R}(\omega)\left\{T^{\bar{\lambda}}_{\hat{\lambda}}\right\} = \sum_{\hat{\lambda}'} T^{\bar{\lambda}}_{\hat{\lambda}'}\, D^{(\lambda)}_{\hat{\lambda}',\hat{\lambda}}(\omega)^{*} \quad . \tag{II.16}$$

Caracterizamos notacionalmente um contratensor (em oposição a um tensor) por meio de uma barra sobre o índice de ordem tensorial.

Dado um tensor T^{λ}, podemos associar-lhe o contratensor $T^{\bar{\lambda}}$ por

$$T^{\bar{\lambda}}_{\hat{\lambda}} = (-)^{\lambda-\hat{\lambda}}\, T^{\lambda}_{-\hat{\lambda}} \quad , \tag{II.17}$$

como decorre da propriedade (II.7). Analogamente, a um contratensor podemos associar um tensor por

$$T^{\bar{\bar{\lambda}}}_{\hat{\lambda}} = (-)^{\lambda-\hat{\lambda}}\, T^{\bar{\lambda}}_{-\hat{\lambda}} \tag{II.18}$$

e é fácil ver que

$$T^{\bar{\bar{\lambda}}} = (-)^{2\lambda}\, T^{\lambda} \quad . \tag{II.19}$$

Pode-se mostrar (Mes 66, p.1071) que (II.17) equivale à rotação $\mathcal{R}_y(\pi)$ de π radianos em torno do eixo y, ou seja,

$$T^{\bar{\lambda}}_{\hat{\lambda}} = \mathcal{R}_y(\pi)\left\{T^{\lambda}_{\hat{\lambda}}\right\} \quad , \tag{II.20}$$

o mesmo sendo também verdadeiro para (II.18), isto é,

$$T^{\bar{\bar{\lambda}}}_{\hat{\lambda}} = \mathcal{R}_y(\pi)\left\{T^{\bar{\lambda}}_{\hat{\lambda}}\right\} \quad . \tag{II.21}$$

Decorre imediatamente de (II.14) que os conjugados hermitianos das componentes de um tensor formam um contratensor.

e vice-versa. Como, em geral, é conveniente trabalhar apenas com tensores, vamos definir a conjugação covariante. Denotando-a por uma barra, temos

$$\overline{T}^{\lambda} = \left(T^{\bar{\lambda}}\right)^{\dagger} \tag{II.22}$$

ou, mais explicitamente,

$$\overline{T}^{\lambda}_{\hat{\lambda}} = (-)^{\lambda-\hat{\lambda}} \left(T^{\lambda}_{-\hat{\lambda}}\right)^{\dagger}. \tag{II.23}$$

Vê-se imediatamente que $\overline{T}^{\lambda}$ é também um tensor, que chamamos tensor conjugado a T^{λ}. Tem-se reciprocidade a menos de um sinal, isto é,

$$\overline{\overline{T}}^{\lambda} = (-)^{2\lambda} T^{\lambda}. \tag{II.24}$$

A conjugação covariante, definida em (II.22) apenas para tensores, pode ser generalizada mediante (II.20), escrevendo-se

$$\overline{T} = \left(\mathcal{R}_y(\pi)\{T\}\right)^{\dagger}. \tag{II.25}$$

ou ainda, pela propriedade (II.14),

$$\overline{T} = \mathcal{R}_y(\pi)\{T^{\dagger}\}. \tag{II.26}$$

Para manipulações envolvendo $\mathcal{R}_y(\pi)$ convém lembrar (Mes 66, p.534) que uma rotação de 2π radianos em torno de qualquer eixo, aplicada a um tensor ou contratensor de ordem λ, tem o único efeito de multiplicá-lo por $(-)^{2\lambda}$. Esquematicamente escrevemos

$$\mathcal{R}_y^2(\pi) = \mathcal{R}_y(2\pi) = (-)^{2\lambda} . \qquad \text{(II.27)}$$

Para finalizar mostremos que não existe ambiguidade de notação em $\bar{T}^{\bar{\lambda}}$, embora haja duas interpretações possíveis. De acordo com uma delas,

$$\bar{T}^{\bar{\lambda}} = \overline{T^{\bar{\lambda}}} = \left(\mathcal{R}_y(\pi)\{T^{\bar{\lambda}}\}\right)^\dagger = \left(\mathcal{R}_y(\pi)\{\mathcal{R}_y(\pi)\{T^\lambda\}\}\right)^\dagger =$$

$$= \left(\mathcal{R}_y^2(\pi)\{T^\lambda\}\right)^\dagger = (-)^{2\lambda}\left(T^\lambda\right)^\dagger$$

e de acordo com a outra,

$$\bar{T}^{\bar{\lambda}} = \left(\bar{T}\right)^{\bar{\lambda}} = \mathcal{R}_y(\pi)\{\bar{T}^\lambda\} = \mathcal{R}_y(\pi)\{\mathcal{R}_y(\pi)\{(T^\lambda)^\dagger\}\} =$$

$$= \mathcal{R}_y^2(\pi)\{(T^\lambda)^\dagger\} = \left(\mathcal{R}_y^2(\pi)\{T^\lambda\}\right)^\dagger = (-)^{2\lambda}\left(T^\lambda\right)^\dagger ,$$

em concordância com a primeira.

II-3) FORMAS MULTILINEARES

DEFINIÇÃO 3 - Dizemos que $\mathcal{L}(S,T,\ldots W)$ é uma <u>forma multilinear</u> nos argumentos S,T,...W, se ela satisfaz as seguintes propriedades

$$\mathcal{L}\left(\sum_i s_i S_i, \sum_j t_j T_j, \ldots \sum_m w_m W_m\right) = \sum_{ij\ldots m} s_i t_j \ldots w_m \, \mathcal{L}(S_i, T_j, \ldots W_m) \qquad \text{(II.28)}$$

e

$$\mathcal{R}(\omega)\{\mathcal{L}(S,T,\ldots W)\} = \mathcal{L}\left(\mathcal{R}(\omega)\{S\}, \mathcal{R}(\omega)\{T\}, \ldots \mathcal{R}(\omega)\{W\}\right), \qquad \text{(II.29)}$$

onde s_i, t_j, ... w_m são números complexos quaisquer e $S = \sum_i s_i S_i$, $T = \sum_j t_j T_j$, ... $W = \sum_m w_m W_m$.

A propriedade (II.28) constitui a definição usual de uma forma multilinear, mas impomos aqui a restrição (II.29) na sua transformada por rotação. Os argumentos S,T,...W podem ser de natureza distinta desde que (II.28) e (II.29) tenham sentido. Resulta de (II.13) que uma combinação linear de formas multilineares (nos mesmos argumentos) é também uma forma multilinear. O número de argumentos de uma forma multilinear é o seu grau e a depender dele ela se diz uma forma bilinear, trilinear, etc. Se todos os argumentos são tensores temos uma forma tensorial (exemplo: o produto direto de tensores) e neste caso a propriedade (II.29) é equivalente a

$$\mathcal{R}(\omega)\{\mathcal{L}(S^{a}_{\hat{a}}, T^{b}_{\hat{b}}, \ldots W^{\ell}_{\hat{\ell}})\} = \sum_{\hat{a}'\hat{b}'\ldots\hat{\ell}'} \mathcal{L}(S^{a}_{\hat{a}'}, T^{b}_{\hat{b}'}, \ldots W^{\ell}_{\hat{\ell}'}) D^{(a)}_{\hat{a}'\hat{a}}(\omega) D^{(b)}_{\hat{b}'\hat{b}}(\omega) \ldots D^{(\ell)}_{\hat{\ell}'\hat{\ell}}(\omega). \quad \text{(II.29')}$$

Seguem alguns exemplos de formas multilineares:

$$\mathcal{L}_1(|\psi\rangle, |\chi\rangle) = |\psi\rangle|\chi\rangle \quad \text{(II.30)}$$

$$\mathcal{L}_2(\langle\psi|, |\phi\rangle) = \langle\psi|\phi\rangle \quad \text{(II.31)}$$

$$\mathcal{L}_3(|\psi\rangle, \langle\phi|) = |\psi\rangle\langle\phi| \quad \text{(II.32)}$$

$$\mathcal{L}_4(\mathcal{O}, |\psi\rangle) = \mathcal{O}|\psi\rangle \quad \text{(II.33)}$$

$$\mathcal{L}_5(\langle\phi|, \mathcal{O}) = \langle\phi|\mathcal{O} \quad \text{(II.34)}$$

$$\mathcal{L}_6(\mathcal{O}, Q) = \mathcal{O}Q \quad \text{(II.35)}$$

$$\mathcal{L}_7(\langle\phi|, \mathcal{O}, |\psi\rangle) = \langle\phi|\mathcal{O}|\psi\rangle \quad \text{(II.36)}$$

$$\mathcal{L}_8(O, H, Q) = O H Q \qquad \text{(II.37)}$$

$$\mathcal{L}_{\pm}(O, Q) = [O, Q]_{\pm} \qquad \text{(II.38)}$$

$$\mathcal{L}'_{\pm}(O, H, Q) = [O, H, Q]_{\pm} \,, \qquad \text{(II.39)}$$

onde O,H e Q são operadores e os segundos membros de (II.38) e (II.39) serão definidos em (IV.8) e (IV.11) respectivamente.

Dada uma forma multilinear $\mathcal{L}$, definimos a <u>forma multilinear conjugada</u> $\mathcal{L}^{\dagger}$ pela relação

$$\mathcal{L}^{\dagger}(W^{\dagger}, \ldots T^{\dagger}, S^{\dagger}) = \mathcal{L}(S, T, \ldots W)^{\dagger} . \qquad \text{(II.40)}$$

(Note-se a inversão na ordem dos argumentos.) Se $\mathcal{L}^{\dagger} = \mathcal{L}$, esta se diz uma <u>forma multilinear autoconjugada</u>.

É fácil verificar que $\mathcal{L}^{\dagger}$ é também uma forma multilinear, a propriedade (II.29) resultando de (II.14). A conjugação definida em (II.40) é recíproca, isto é,

$$\mathcal{L}^{\dagger\dagger} = \mathcal{L} . \qquad \text{(II.41)}$$

Nos exemplos acima, $\mathcal{L}_2, \mathcal{L}_3, \mathcal{L}_6, \mathcal{L}_7, \mathcal{L}_8, \mathcal{L}_{\pm}$ e $\mathcal{L}'_{\pm}$ são autoconjugadas, enquanto $\mathcal{L}_4^{\dagger} = \mathcal{L}_5$.

Em muitos casos é mais conveniente trabalhar com a conjugação covariante definida em (II.25). Mostra-se facilmente que

$$\overline{\mathcal{L}(S, T, \ldots W)} = \mathcal{L}^{\dagger}(\overline{W}, \ldots \overline{T}, \overline{S}) . \qquad \text{(II.42)}$$

O conjugado covariante de uma forma tensorial será, portanto, também uma forma tensorial e valerá a reciprocidade a menos de

um sinal, isto é,

$$\overline{\mathcal{L}(S^{a}_{\hat{a}}, T^{b}_{\hat{b}}, \ldots W^{e}_{\hat{e}})} = (-)^{2(a+b+\cdots+e)} \mathcal{L}(S^{a}_{\hat{a}}, T^{b}_{\hat{b}}, \ldots W^{e}_{\hat{e}}), \quad \text{(II.43)}$$

conforme resulta de (II.24).

Consideremos o sistema de equações

$$\mathcal{L}(S_i, T_j, \ldots W_m) = 0 \quad \text{(II.44)}$$

com $i \in I$, $j \in J$, $\ldots m \in M$ e $\mathcal{L}$ uma forma multilinear. Se efetuamos as substituições lineares

$$\begin{aligned} S'_{i'} &= \sum_i s_{i'i} S_i \\ T'_{j'} &= \sum_j t_{j'j} T_j \\ &\cdots\cdots\cdots \\ W'_{m'} &= \sum_m w_{m'm} W_m \end{aligned} \quad \text{(II.45)}$$

com $s_{i'i}$, $t_{j'j}$, $\ldots w_{m'm}$ números complexos quaisquer, decorre de (II.28) que vale também o sistema

$$\mathcal{L}(S'_{i'}, T'_{j'}, \ldots W'_{m'}) = 0 \quad \text{(II.46)}$$

com $i' \in I'$, $j' \in J'$, $\ldots m' \in M'$. Em particular, se todas as substituições lineares têm inverso, os dois sistemas são equivalentes.

II-4) ACOPLAMENTO TENSORIAL

Comecemos pelo bem conhecido problema da adição de dois momentos angulares: Se $|a\hat{a}\rangle$ e $|b\hat{b}\rangle$ são auto-estados de dois momentos angulares independentes, os auto-estados de sua soma

são dados por

$$|(a\,b)\,\Gamma\,\hat{\Gamma}\rangle = \sum_{\hat{a}\,\hat{b}} C^{a\;b\;\Gamma}_{\hat{a}\;\hat{b}\;\hat{\Gamma}}\; |a\,\hat{a}\rangle\,|b\,\hat{b}\rangle \quad , \tag{II.47}$$

onde $C^{ab\Gamma}_{\hat{a}\hat{b}\hat{\Gamma}}$ são os coeficientes de Clebsh-Gordan com a normalização e a convenção de fases de Condon e Shortley (Fre 66; Mes 66; ShT 63).

Esses coeficientes são todos reais e (já que (II.47) é uma mudança de base) satisfazem as relações de ortonormalidade

$$\sum_{\hat{a}\,\hat{b}} C^{a\;b\;c}_{\hat{a}\;\hat{b}\;\hat{c}}\; C^{a\;b\;c'}_{\hat{a}\;\hat{b}\;\hat{c}'} = \delta_{c\,c'}\,\delta_{\hat{c}\,\hat{c}'} \tag{II.48}$$

e

$$\sum_{c\,\hat{c}} C^{a\;b\;c}_{\hat{a}\;\hat{b}\;\hat{c}}\; C^{a\;b\;c}_{\hat{a}'\hat{b}'\hat{c}} = \delta_{\hat{a}\,\hat{a}'}\,\delta_{\hat{b}\hat{b}'} \quad . \tag{II.49}$$

O coeficiente $C^{abc}_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}}$ se anula a menos que(*)

$$\hat{a} + \hat{b} = \hat{c} \tag{II.50}$$

e

$$\delta(a\,b\,c) = 1 \quad , \tag{II.51}$$

onde foi introduzida a <u>função delta de Racah</u> (FRa 59, p.52), que é igual a 1 ou 0 conforme a,b e c satisfaçam ou não a condição triangular, qual seja:

(*) Subentende-se que $\hat{a}$ = a,a-1,...-a; $\hat{b}$ = b,b-1,...-b e $\hat{c}$ = c,c-1,...-c.

$$a + b + c = \text{inteiro} \quad \text{e}$$

$$|a-b| \leqslant c \leqslant a + b \,. \tag{II.52}$$

Essa função é simétrica nos três argumentos, que devem ser inteiros ou semi-inteiros não-negativos.

Lembremos ainda a propriedade de simetria

$$C^{a\ b\ c}_{\hat{a}\ \hat{b}\ \hat{c}} = (-)^{a+b-c}\, C^{b\ a\ c}_{\hat{b}\ \hat{a}\ \hat{c}} \tag{II.53}$$

e os seguintes valores particulares:

$$C^{a\ a\ (a+a)}_{a\ a\ (a+a)} = 1 \,, \tag{II.54}$$

$$C^{a\ 0\ a}_{\hat{a}\ 0\ \hat{a}} = C^{0\ a\ a}_{0\ \hat{a}\ \hat{a}} = 1 \tag{II.55}$$

e

$$C^{a\ a\ 0}_{\hat{a}\ -\hat{a}\ 0} = \frac{(-)^{a-\hat{a}}}{[a]^{1/2}} \,, \tag{II.56}$$

onde foi introduzida a notação (Fre 66)

$$[a] = 2a + 1 \,. \tag{II.57}$$

De um modo geral, expressões racionais envolvendo exclusivamente índices de ordem tensorial, colocadas entre colchetes, devem ser interpretadas de forma análoga a (II.57); por exemplo,

$$\left[\frac{a\ b}{c}\right] = \frac{(2a+1)(2b+1)}{(2c+1)} \,. \tag{II.58}$$

Calculando-se a transformada por rotação de ambos os membros de (II.47), obtém-se a igualdade

$$\sum_{\hat{\Gamma}'} C^{a\,b\,\Gamma}_{\hat{a}'\hat{b}'\hat{\Gamma}'} D^{(\Gamma)}_{\hat{\Gamma}'\hat{\Gamma}}(\omega) = \sum_{\hat{a}\,\hat{b}} D^{(a)}_{\hat{a}'\hat{a}}(\omega) D^{(b)}_{\hat{b}'\hat{b}}(\omega) C^{a\,b\,\Gamma}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\Gamma}} \quad , \qquad \text{(II.59)}$$

que nada mais é que a decomposição, em parcelas irredutíveis, do produto de duas matrizes de rotação e poderia ter sido equivalentemente usada como definição dos coeficientes de Clebsh-Gordan, que, na verdade, são determinados apenas pelas propriedades do grupo SU(2). Isso justifica a seguinte generalização de (II.47):

Dada qualquer forma tensorial $\mathcal{L}(S^a_{\hat{a}}, T^b_{\hat{b}})$ de grau 2, a correspondente <u>forma acoplada</u>

$$\mathcal{L}(S^a, T^b)^{\Gamma}_{\hat{\Gamma}} = \sum_{\hat{a}\hat{b}} C^{a\,b\,\Gamma}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\Gamma}} \mathcal{L}(S^a_{\hat{a}}, T^b_{\hat{b}}) \qquad \text{(II.60)}$$

é um tensor de ordem Γ. Pode acontecer, no entanto, que esse tensor seja nulo, mesmo para valores de Γ satisfazendo a condição triangular. Por meio da relação de ortonormalidade (II.49), é possível inverter (II.60), obtendo-se a igualdade equivalente

$$\mathcal{L}(S^a_{\hat{a}}, T^b_{\hat{b}}) = \sum_{\Gamma\hat{\Gamma}} C^{a\,b\,\Gamma}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\Gamma}} \mathcal{L}(S^a, T^b)^{\Gamma}_{\hat{\Gamma}} \, . \qquad \text{(II.61)}$$

Do mesmo modo que se estende (II.47) para mais de dois momentos angulares, (II.60) pode ser estendida para formas de grau maior que 2. Como se sabe, passa a haver, então, mais de um esquema de acoplamento possível. Para formas tensoriais de grau 3, por exemplo, temos as formas acopladas

$$\mathcal{L}((S^a,T^b)^\alpha,U^c)^\Gamma_{\hat{\Gamma}} = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}}\sum_{\hat{\alpha}} C^{ab\alpha}_{\hat{a}\hat{b}\hat{\alpha}}\, C^{\alpha c\Gamma}_{\hat{\alpha}\hat{c}\hat{\Gamma}}\, \mathcal{L}(S^a_{\hat{a}},T^b_{\hat{b}},U^c_{\hat{c}}) \qquad \text{(II.62)}$$

e

$$\mathcal{L}(S^a,(T^b,U^c)^\beta)^\Gamma_{\hat{\Gamma}} = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}}\sum_{\hat{\beta}} C^{a\beta\Gamma}_{\hat{a}\hat{\beta}\hat{\Gamma}}\, C^{bc\beta}_{\hat{b}\hat{c}\hat{\beta}}\, \mathcal{L}(S^a_{\hat{a}},T^b_{\hat{b}},U^c_{\hat{c}}) \; ; \qquad \text{(II.63)}$$

para formas tensoriais de grau 4 temos, entre outras,

$$\mathcal{L}((S^a,T^b)^\alpha,(U^c,V^d)^\beta)^\Gamma_{\hat{\Gamma}} = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}\hat{d}}\sum_{\hat{\alpha}\hat{\beta}} C^{ab\alpha}_{\hat{a}\hat{b}\hat{\alpha}}\, C^{cd\beta}_{\hat{c}\hat{d}\hat{\beta}}\, C^{\alpha\beta\Gamma}_{\hat{\alpha}\hat{\beta}\hat{\Gamma}}\, \mathcal{L}(S^a_{\hat{a}},T^b_{\hat{b}},U^c_{\hat{c}},V^d_{\hat{d}}) \qquad \text{(II.64)}$$

e

$$\mathcal{L}(\overbrace{S^a,\underbrace{T^b,U^c}_{\delta},V^d}^{\gamma})^\Gamma_{\hat{\Gamma}} = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}\hat{d}}\sum_{\hat{\gamma}\hat{\delta}} C^{ac\gamma}_{\hat{a}\hat{c}\hat{\gamma}}\, C^{bd\delta}_{\hat{b}\hat{d}\hat{\delta}}\, C^{\gamma\delta\Gamma}_{\hat{\gamma}\hat{\delta}\hat{\Gamma}}\, \mathcal{L}(S^a_{\hat{a}},T^b_{\hat{b}},U^c_{\hat{c}},V^d_{\hat{d}}) \; ; \qquad \text{(II.65)}$$

e assim por diante. Os somatórios sobre os índices de projeção intermediários (como $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{\gamma}$ e $\hat{\delta}$) reduzem-se sempre, devido à condição (II.50), a um único termo, denominado coeficiente de acoplamento.

Os coeficientes de acoplamento, sendo produtos de coeficientes de Clebsh-Gordan, são todos reais e satisfazem relações de ortonormalidade, generalizações de (II.48) e (II.49), que permitem inverter as fórmulas de acoplamento, tais como (II.62-65), analogamente ao que foi feito em (II.61).

II-5) NOTAÇÃO POLIGONAL. ESQUEMAS CONJUGADOS

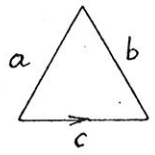
Expressões envolvendo coeficientes de acoplamento (ver equações (II.62-65)) tendem a ser longas e de leitura difícil. É desejável, então, escrevê-las de forma mais compacta, para o que vamos introduzir uma notação poligonal semelhan

te à de J.B.French (Fre 66).

Começando pelo acoplamento de grau 2, (II.60), cujos coeficientes são simplesmente os coeficientes de Clebsh-Gordan, escrevemos

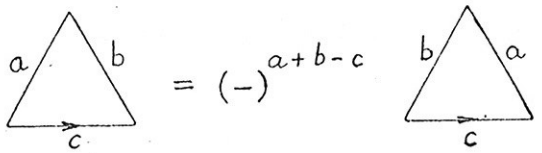
$$C^{a\,b\,\Gamma}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\Gamma}} = \quad a\,\hat{a} \quad b\,\hat{b} \quad \Gamma\,\hat{\Gamma} \qquad \text{(II.66)}$$

Por comodidade, omitiremos no que vem a seguir, sempre que não houver dúvida, alguns ou todos os índices de projeção. Exemplo:



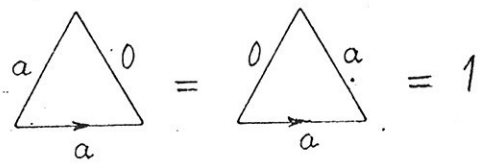
(II.67)

Deve-se subentender em tais casos que os índices de projeção omitidos podem tomar quaisquer valores(*) obedecendo à condição (II.50). Se isso não for possível o símbolo deverá ser identificado a zero. Em igualdades que envolvem mais de um polígono, cada índice omitido deverá tomar o mesmo valor em todos eles. Assim, reescreveremos (II.53) e (II.55) nas formas



(II.68)

e

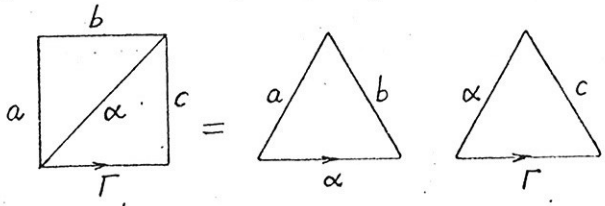


(II.69)

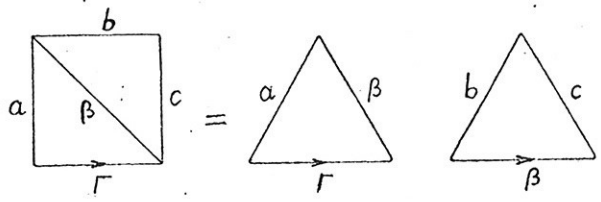
respectivamente.

(*) Ver nota na página 20

A notação estende-se de modo óbvio para coeficientes de acoplamento de qualquer grau e escrevemos, por exemplo,

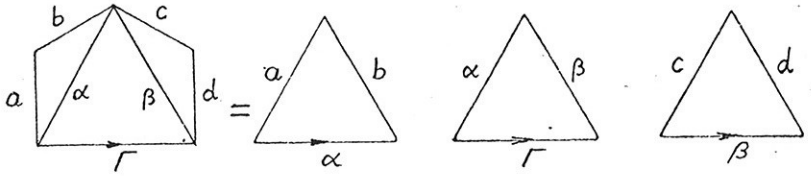


(II.70)



(II.71)

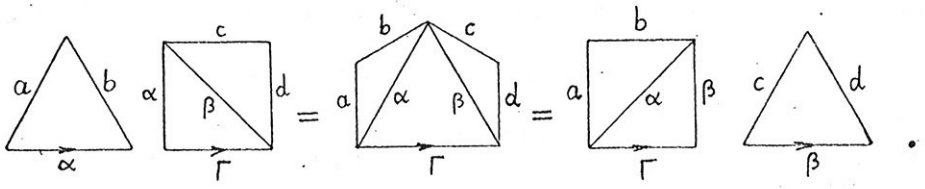
e



(II.72)

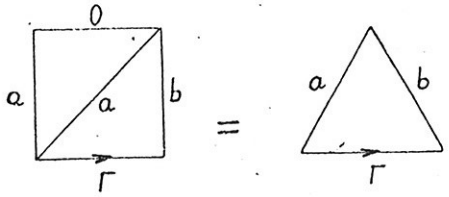
para os que aparecem em (II.62), (II.63) e (II.64) respectivamente.

Vemos acima que os polígonos se fatorizam em triângulos, o que dá lugar a diversas manipulações úteis. Assim, além de (II.72), podemos também escrever



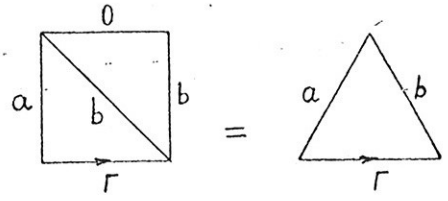
(II.73)

Por outro lado, (II.69) permite escrever tanto



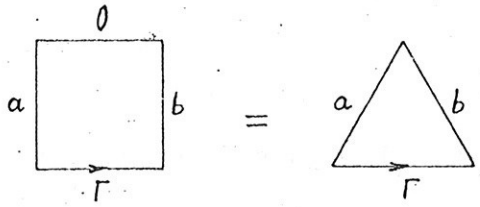
(II.74)

como



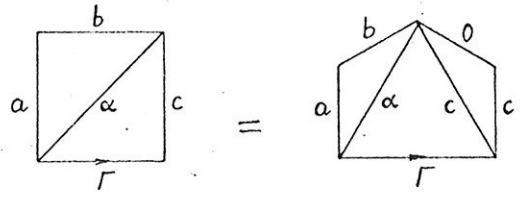
(II.75)

ou ainda, já que o acoplamento intermediário não é importante neste caso, simplesmente



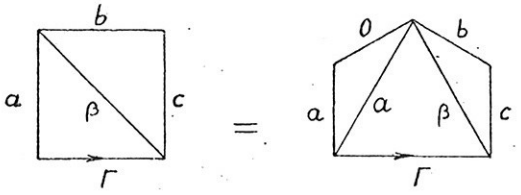
(II.76)

Analogamente, temos



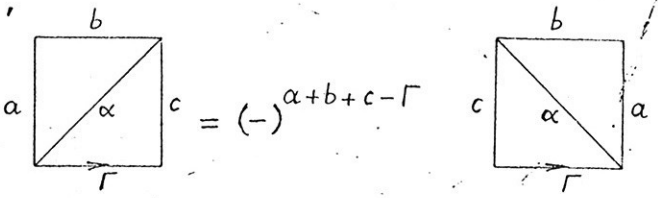
(II.77)

e

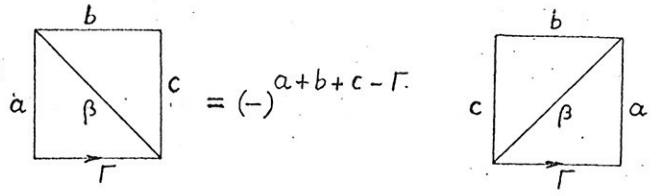


(II.78)

Usando (II.68) diversas vezes podemos obter, por exemplo,

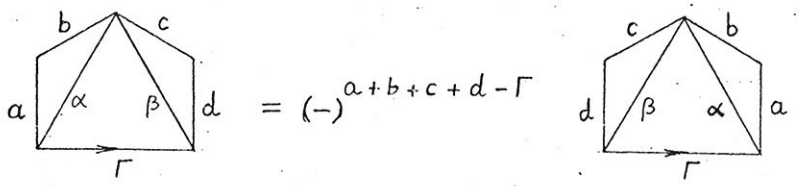


(II.79)



(II.80)

e



(II.81)

Os esquemas de acoplamento que aparecem nos dois membros de cada uma das igualdades (II.68), (II.79), (II.80) e (II.81) são exemplos de pares de esquemas de acoplamento conjugados. Tais são esquemas que se obtêm um do outro invertendo a ordem de todos os acoplamentos tensoriais. Os coeficientes de acoplamento correspondentes, como se percebe dessas equações, diferem apenas por um sinal, $(-)^G$, onde G é um inteiro igual ao perímetro da poligonal externa com a resultante contada negativa

mente. Como uma aplicação dessas idéias, temos (lembrando a equação (II.42) e a realidade dos coeficientes de acoplamento) o seguinte resultado, válido qualquer que seja o esquema de acoplamento escolhido:

$$\overline{\mathcal{L}_0(\underbrace{S^a, T^b, \ldots W^e}_{\text{esquema}})^\Gamma} = (-)^G \mathcal{L}^\dagger(\underbrace{\bar{W}^e, \ldots \bar{T}^b, \bar{S}^a}_{\text{esquema conjugado}})^\Gamma \qquad \text{(II.82)}$$

onde $G = a+b+\ldots+e-\Gamma$. Para comutadores e anticomutadores, devido às identidades (IV.12a) e (IV.12b), temos também

$$[S^a, T^b]^\Gamma_\pm = \pm(-)^{a+b-\Gamma}[T^b, S^a]^\Gamma_\pm \qquad \text{(II.83)}$$

e

$$[S^a, H^0, T^b]^\Gamma_\pm = \mp(-)^{a+b-\Gamma}[T^b, H^0, S^a]^\Gamma_\pm \,, \qquad \text{(II.84)}$$

o que permite, em combinação com (II.82), escrever

$$\overline{[S^a, T^b]^\Gamma_\pm} = \pm[\bar{S}^a, \bar{T}^b]^\Gamma_\pm \qquad \text{(II.85)}$$

e

$$\overline{[S^a, H^0, T^b]^\Gamma_\pm} = \mp[\bar{S}^a, \bar{H}^0, \bar{T}^b]^\Gamma_\pm \,. \qquad \text{(II.86)}$$

II-6) REACOPLAMENTO

Consideremos a adição de quatro momentos angulares independentes. Conforme escolhamos o esquema (II.64) ou o (II.65), obteremos, para o subespaço do autovalor $\Gamma\hat{\Gamma}$ do momento angular total, as bases

$$\left| \begin{array}{ccccc} a & & \alpha & & d \\ & b & & c & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}\hat{d}} \left| \begin{array}{ccccc} a\hat{a} & & \alpha & & d\hat{d} \\ & b\hat{b} & & c\hat{c} & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle |a\hat{a}\rangle|b\hat{b}\rangle|c\hat{c}\rangle|d\hat{d}\rangle \quad \text{(II.87)}$$

e

$$\left| \begin{array}{ccccc} a & & \gamma & & d \\ & c & & b & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}\hat{d}} \left| \begin{array}{ccccc} a\hat{a} & & \gamma & & d\hat{d} \\ & c\hat{c} & & b\hat{b} & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle |a\hat{a}\rangle|b\hat{b}\rangle|c\hat{c}\rangle|d\hat{d}\rangle \quad \text{(II.88)}$$

respectivamente. Podemos passar de uma à outra pela transformação unitária

$$\left| \begin{array}{ccccc} a & & \alpha & & d \\ & b & & c & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle = \sum_{\gamma\delta} \overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}} \left| \begin{array}{ccccc} a & & \gamma & & d \\ & c & & b & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle , \quad \text{(II.89)}$$

onde o símbolo entre chaves é um <u>coeficiente de reacoplamento</u>. Introduzindo acima as equações (II.87) e (II.88), obtemos

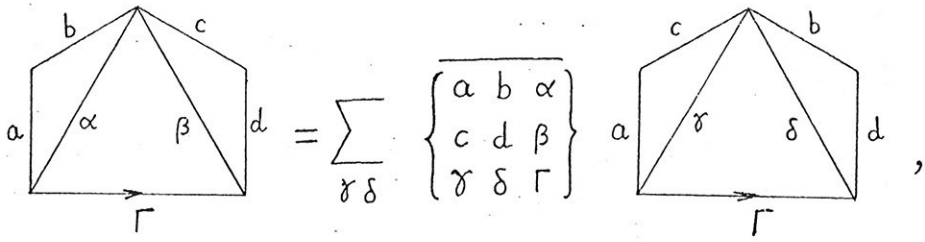
$$\left| \begin{array}{ccccc} a\hat{a} & & \alpha & & d\hat{d} \\ & b\hat{b} & & c\hat{c} & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle = \sum_{\gamma\delta} \overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}} \left| \begin{array}{ccccc} a\hat{a} & & \gamma & & d\hat{d} \\ & c\hat{c} & & b\hat{b} & \\ & & \Gamma\hat{\Gamma} & & \end{array} \right\rangle \quad \text{(II.90)}$$

e se multiplicamos ambos os membros pela forma tensorial

$\mathcal{L}(S^a_{\hat{a}}, T^b_{\hat{b}}, U^c_{\hat{c}}, V^d_{\hat{d}})$ e somamos sobre os índices de projeção (exceto $\hat{\Gamma}$), obtemos, por sua vez,

$$\mathcal{L}((S^a,T^b)^\alpha,(U^c,V^d)^\beta)^\Gamma_{\hat{\Gamma}} = \sum_{\gamma\delta} \overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}} \mathcal{L}(\overbrace{S^a,\underbrace{T^b,U^c}_{\delta}}^{\gamma},V^d)^\Gamma_{\hat{\Gamma}} \,. \qquad \text{(II.91)}$$

As três últimas equações são equivalentes e se escrevem na única forma

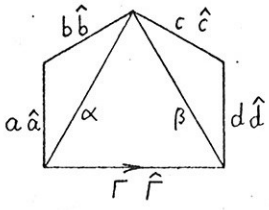


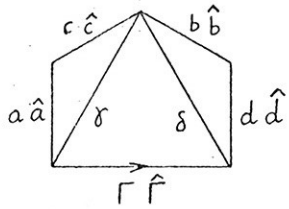
(II.92)

onde os polígonos podem ser, agora, interpretados não apenas como coeficientes de acoplamento, (II.90), mas também como auto-estados do momento angular total, (II.89), ou ainda como formas tensoriais acopladas, (II.91). Temos em (II.92), que exibe uma relação entre dois esquemas de acoplamento, um exemplo típico de uma fórmula de reacoplamento.

A multiplicidade de interpretações de (II.92) pode ser usada com proveito: Assim, se interpretamos os polígonos como tensores, resulta imediatamente que os coeficientes de reacoplamento são independentes de $\hat{\Gamma}$. Por outro lado, interpretando-os como coeficientes de acoplamento e usando a ortonormalidade destes (seção II-4), obtemos expressões explícitas para os coeficientes de reacoplamento como

$$\overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}} = \sum_{\hat{a}\hat{b}\hat{c}\hat{d}}$$



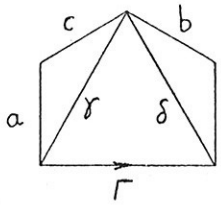


, (II.93)

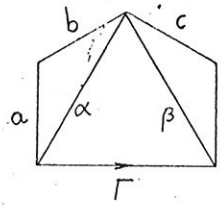
mostrando que os mesmos são reais. Finalmente, a interpretação dos polígonos como vetores de base dá lugar à relação de ortonormalidade

$$\sum_{\gamma\delta} \overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha' \\ c & d & \beta' \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}} \begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix} = \delta_{\alpha'\alpha}\, \delta_{\beta'\beta} \quad , \qquad \text{(II.94)}$$

que permite inverter (II.92), obtendo-se



$$= \sum_{\alpha\beta} \overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}}$$



(II.95)

Vê-se, também, que os coeficientes de reacoplamento se anulam a menos que as condições triangulares relevantes sejam satisfeitas. Todas essas propriedades se generalizam para qualquer fórmula de reacoplamento.

Os coeficientes de reacoplamento que aparecem em (II.92) estão relacionados com os bem conhecidos <u>símbolos de 9j</u> pela equação

$$\overline{\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix}} = [\alpha\,\beta\,\gamma\,\delta]^{1/2} \begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ c & d & \beta \\ \gamma & \delta & \Gamma \end{Bmatrix} \quad . \qquad \text{(II.96)}$$

Estes satisfazem às seguintes propriedades de simetria (Mes 66; ShT 63):

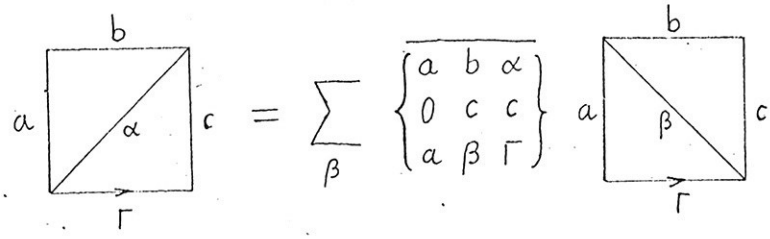
1º) São invariantes por reflexão em qualquer das duas diagonais.

2º) São invariantes por permutações pares de colunas ou de linhas.

3º) Ficam multiplicados por $(-)^{\Sigma}$ se submetidos a permutações ímpares de colunas ou de linhas. Σ é a soma dos nove índices de ordem tensorial que aparecem no símbolo.

As propriedades correspondentes dos coeficientes de reacoplamento podem ser obtidas a partir de (II.96).

Todas as fórmulas de reacoplamento de que necessitaremos deduzem-se de (II.92) por manipulações do tipo indicado na seção II-5. Por exemplo, de (II.77), (II.78) e (II.92) obtemos



(II.97)

Os coeficientes de reacoplamento que aparecem acima podem ser escritos em termos dos coeficientes de Racah do seguinte modo (Fre 66, p.281):

$$\begin{Bmatrix} a & b & \alpha \\ 0 & c & c \\ a & \beta & \Gamma \end{Bmatrix} = [\alpha\beta]^{1/2}\, W(a\, b\, \Gamma\, c : \alpha\, \beta) \,. \qquad \text{(II.98)}$$

Além das propriedades que decorrem simplesmente daquelas dos símbolos de 9j, eles satisfazem também:

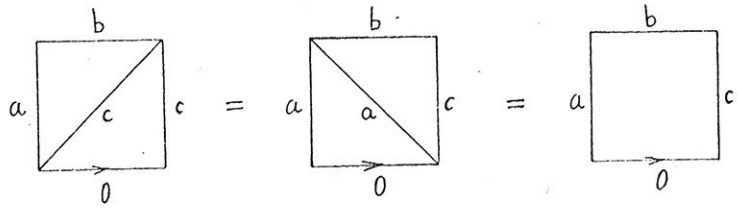
$$W(a\,b\,c\,d : e\,f) = (-)^{a+d-e-f}\, W(e\,b\,c\,f : a\,d) \,.$$

$$= (-)^{b+c-e-f}\, W(a\,e\,f\,d : b\,c) \qquad \text{(II.99)}$$

e

$$W(a\,b\,0\,c : c\,a) = [ac]^{-1/2}\,\delta(a\,b\,c)\,. \qquad \text{(II.100)}$$

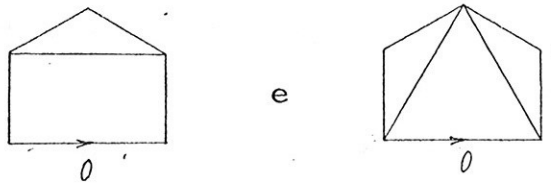
Esta última, introduzida em (II.97), dá lugar a



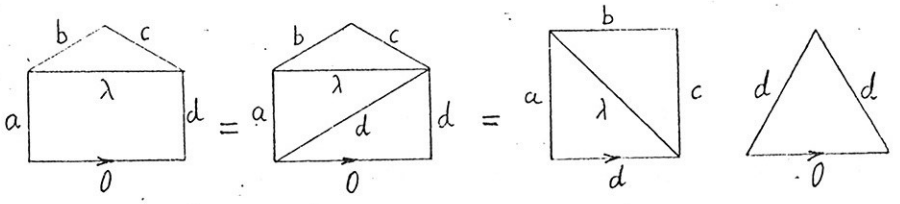
, (II.101)

justificando-se o último polígono por ser irrelevante o acoplamento intermediário.

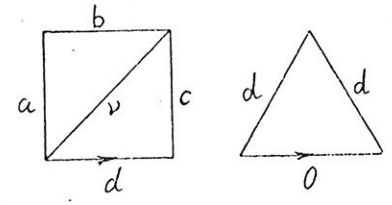
Como uma ilustração típica, vamos obter a fórmula de reacoplamento entre os esquemas



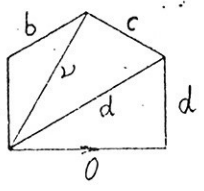
Baseados em (II.101) e outros resultados anteriores escrevemos



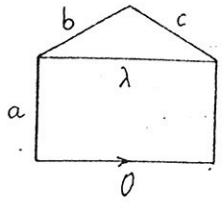
$$= \sum_{\nu} \overline{\begin{Bmatrix} a & 0 & a \\ b & c & \chi \\ \nu & c & d \end{Bmatrix}}$$



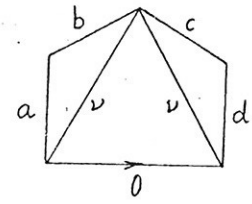
$$= \sum_{\nu} \overline{\begin{Bmatrix} a & 0 & a \\ b & c & \lambda \\ \nu & c & d \end{Bmatrix}}$$



e, usando (II.101) mais uma vez, obtemos finalmente



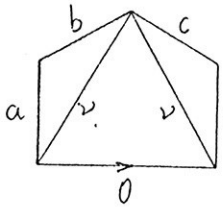
$$= \sum_{\nu} \overline{\begin{Bmatrix} a & 0 & a \\ b & c & \lambda \\ \nu & c & d \end{Bmatrix}}$$



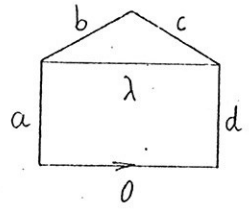
, (II.102)

que é a fórmula procurada.

Chamemos a atenção para dois pontos: Primeiro, há em geral mais de um caminho para chegar a uma dada fórmula de reacoplamento. Embora os resultados sejam equivalentes, o coeficiente de reacoplamento pode vir expresso de modos diferentes (envolvendo somatórios, por exemplo) a depender dele, sendo conveniente escolher o que leve à expressão mais simples possível. Segundo, como já foi dito, qualquer fórmula de reacoplamento pode ser invertida; portanto de (II.102) resulta também



$$= \sum_{\lambda} \overline{\begin{Bmatrix} a & 0 & a \\ b & c & \lambda \\ \nu & c & d \end{Bmatrix}}$$



. (II.102')

Diversas propriedades de coeficientes de reacoplamento, como valores particulares quando alguns argumentos são nulos, regras de soma etc., podem ser encontradas em (Mes 66) e (ShT 63). Muitas delas se obtêm do que foi dito acima. Por exemplo, de (II.98), (II.99) e (II.100) mostra-se que

$$\overline{\begin{Bmatrix} a & b & c \\ a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix}} = \left[\frac{c}{a\ b}\right]^{-1/2} \delta(a\,b\,c) \,. \qquad \text{(II.103)}$$

II-7) FORMAS INVARIANTES. TEOREMA DE WIGNER-ECKART

Seja $\mathcal{J}$ uma forma invariante, isto é, uma forma multilinear satisfazendo

$$\mathcal{R}(\omega)\{\mathcal{J}\} = \mathcal{J} \tag{II.104}$$

para qualquer rotação. Como se pode ver em (II.15), lembrando-se que $D^{(0)}_{00}(\omega)=1$, $\mathcal{J}$ é por definição um tensor de ordem nula. No caso particular importante em que $\mathcal{J}$ é, também, uma forma tensorial de grau dois, resulta, então, de (II.61) que

$$\mathcal{J}(S^a, T^b)^\Gamma = \delta_{0\Gamma}\, \mathcal{J}(S^a, T^b)^0 \tag{II.105}$$

ou, o que é o mesmo,

$$\mathcal{J}(S^a_{\hat{a}}, T^b_{\hat{b}}) = C^{a\,b\,0}_{\hat{a}\,\hat{b}\,0}\, \mathcal{J}(S^a, T^b)^0 . \tag{II.106}$$

Outro tipo de forma invariante é

$$\mathcal{J}_1((S^a_{\hat{a}})^+, T^b_{\hat{b}}) . \tag{II.107}$$

Em vista de (II.23) temos

$$\mathcal{J}_1((S^a_{\hat{a}})^+, T^b_{\hat{b}}) = (-)^{a+\hat{a}}\, \mathcal{J}_1(\bar{S}^a_{-\hat{a}}, T^b_{\hat{b}}) \tag{II.108}$$

e, introduzindo (II.106) no segundo membro,

$$\mathcal{J}_1((S^a_{\hat{a}})^+, T^b_{\hat{b}}) = \delta_{ab}\,\delta_{\hat{a}\hat{b}}\,\frac{\mathcal{J}_1(\bar{S}^a, T^b)^0}{[a]^{1/2}} = \delta_{\hat{a}\hat{b}}\,\frac{\mathcal{J}_1(\bar{S}^a, T^b)^0}{[a]^{1/2}} , \tag{II.109}$$

sendo dispensável o δ_{ab}, pois a forma acoplada é necessariamente nula para a≠b. Uma aplicação importante desse resultado é:

$$\langle \psi^a_{\hat{a}} \,|\, \phi^b_{\hat{b}} \rangle = \delta_{ab}\,\delta_{\hat{a}\hat{b}}\,\frac{\langle \psi^a \| \phi^b \rangle}{[a]^{1/2}} \quad , \tag{II.110}$$

onde notamos que o primeiro membro é uma forma invariante (ver (II.4,4')) do tipo (II.107) e introduzimos a notação

$$\langle \psi^a \| \phi^b \rangle = (\bar{\psi}^a \phi^b)^0 \, . \tag{II.111}$$

Partindo da identidade

$$\langle \psi^a_{\hat{a}} | \mathcal{O}^b_{\hat{b}} | \phi^c_{\hat{c}} \rangle = \sum_{\Gamma \hat{\Gamma}} C^{b\ c\ \Gamma}_{\hat{b}\ \hat{c}\ \hat{\Gamma}} \langle \psi^a_{\hat{a}} | (\mathcal{O}^b \phi^c)^{\Gamma}_{\hat{\Gamma}} \rangle$$

$$= \sum_{\Gamma \hat{\Gamma}} C^{b\ c\ \Gamma}_{\hat{b}\ \hat{c}\ \hat{\Gamma}} \, \mathcal{J}_1 (\langle \psi^a_{\hat{a}} |\, , \, |(\mathcal{O}^b \phi^c)^{\Gamma}_{\hat{\Gamma}} \rangle)$$

e usando o resultado (II.109), obtemos

$$\langle \psi^a_{\hat{a}} | \mathcal{O}^b_{\hat{b}} | \phi^c_{\hat{c}} \rangle = C^{b\ c\ a}_{\hat{b}\ \hat{c}\ \hat{a}} \, \frac{(\bar{\psi}^a \mathcal{O}^b \phi^c)^0}{[a]^{1/2}} \, . \tag{II.112}$$

Este é o <u>teorema de Wigner-Eckart</u>, usualmente escrito na forma (FRa 59; Mes 66)

$$\langle \psi^a_{\hat{a}} | \mathcal{O}^b_{\hat{b}} | \phi^c_{\hat{c}} \rangle = C^{c\ b\ a}_{\hat{c}\ \hat{b}\ \hat{a}} \, \frac{\langle \psi^a \| \mathcal{O}^b \| \phi^c \rangle}{[a]^{1/2}} \quad , \tag{II.113}$$

com o <u>elemento de matriz reduzido</u> dado, portanto, por

$$\langle \psi^a \| \mathcal{O}^b \| \phi^c \rangle = (-)^{b+c-a} \left(\bar{\psi}^a \mathcal{O}^b \phi^c \right)^0 . \qquad \text{(II.114)}$$

Para finalizar, notando que no presente caso a conjugação complexa coincide com a conjugação covariante e lembrando o resultado (II.82), temos

$$\langle \psi^a \| \mathcal{O}^b \| \phi^c \rangle^* = \left(\bar{\phi}^c \bar{\mathcal{O}}^b \psi^a \right)^0 \qquad \text{(II.115)}$$

e, portanto,

$$\langle \psi^a \| \mathcal{O}^b \| \phi^c \rangle^* = (-)^{a+b-c} \langle \phi^c \| \bar{\mathcal{O}}^b \| \psi^a \rangle . \qquad \text{(II.116)}$$

Antes de concluir este capítulo, mencionemos um ponto importante. Até agora estávamos implicitamente supondo que os índices tensoriais se referiam a tensores do grupo SU(2). Pode ocorrer, no entanto, que desejemos trabalhar com tensores do grupo SU(2)xSU(2), por exemplo, como em Física Nuclear se quizermos levar em conta simultaneamente a invariância da hamiltoniana por rotações propriamente ditas (momento angular J) e por rotações no espaço de cargas (isospin T). Todas as equações deste capítulo permanecem válidas desde que as reinterpretemos como escritas numa notação compacta. No caso acima, por exemplo, teríamos $\Lambda = JT$, $\lambda = jt$, etc., e

$$S^{\Lambda} = S^{JT} ,$$

$$[\Lambda] = (2J+1)(2T+1) , \qquad \text{(II.117)}$$

$$C^{\lambda_1 \lambda_2 \Lambda}_{\hat{\lambda}_1 \hat{\lambda}_2 \hat{\Lambda}} = C^{j_1 j_2 J}_{\hat{j}_1 \hat{j}_2 \hat{J}} \, C^{t_1 t_2 T}_{\hat{t}_1 \hat{t}_2 T}$$

etc..

CAPÍTULO III

TÉCNICAS TENSORIAIS NO FORMALISMO DE SEGUNDA QUANTIZAÇÃO

III-1) INTRODUÇÃO

As técnicas tensoriais desenvolvidas no capítulo anterior são aqui ilustradas no contexto do formalismo de segunda quantização. Em particular, calculamos detalhadamente certos comutadores e duplos-comutadores acoplados, que serão necessários para as equações de movimento para excitações partícula-partícula, como veremos nas seções IV-5 e V-2. Ao mesmo tempo introduzimos a maior parte da notação, bem semelhante à de French (Fre 66; Fre + 69), que será usada neste trabalho.

Começamos, na seção III-2, ressaltando o caráter tensorial dos operadores de criação e de aniquilação e tratando de diversas propriedades que advêm dele, como a expressão da hamiltoniana em forma acoplada. Passamos então ao cálculo dos comutadores e, como as expressões costumam ser longas, introduzimos na seção III-3 os símbolos de anti-simetrização, que permitem escrevê-las mais compactamente. Uma dificuldade no cálculo de comutadores acoplados é a necessidade de tratar simultaneamente os algebrismos de Fock e de Racah. Para facilitar a tarefa calculamos inicialmente, na seção III-4, os comutadores em forma não-acoplada, usando o procedimento usual. Posteriormente, na seção III-5, introduzimos então o acoplamento tensorial. Necessitamos, para as aplicações feitas nesta tese, ape

nas de comutadores envolvendo alguma ordem tensorial nula, os quais listamos na seção III-6. Finalmente, na seção III-7, damos as expressões, bem mais simples, que resultam quando os orbitais podem ser rotulados apenas pelos índices de ordem tensorial. Alguns dos comutadores acoplados mais simples podem ser também encontrados no apêndice de L.S. Hsu ao artigo de French (Fre 66), onde os símbolos de anti-simetrização são denotados por $E_{ab\Gamma}$.

III-2) OPERADORES DE ESTADO. HAMILTONIANA

É bem conhecida a conveniência do formalismo de segunda quantização quando se lida com estados de muitos fermions. Escolhemos, aqui, para estados ortonormais de base da partícula 1, os tensores $\psi^{r}_{\hat{r}}(1)$, onde r representa, agora, não apenas a ordem tensorial, mas também os demais rótulos que com $\hat{r}$ especificam completamente o estado. Assim, no modelo de camadas r poderia rotular um orbital para nêutrons e teríamos, mais explicitamente,

$$r = n_r \ell_r j_r \qquad \text{e} \qquad \hat{r} = m_r \ . \tag{III.1}$$

A própria notação deixa claro quando r representa apenas a ordem tensorial. Por exemplo, no caso acima

$$[r] = 2j_r + 1 \ . \qquad \text{(III.2)}$$

Em segunda quantização, introduzem-se o vácuo $|\ \rangle$ e <u>operadores de criação</u> $a^{\dagger}_{r\hat{r}}$ e de <u>aniquilação</u> a_{rr} tais que

$$a^{\dagger}_{r\hat{r}}\,|\ \rangle = \psi^{r}_{\hat{r}}(1) \ , \qquad \text{(III.3)}$$

$$a_{r\hat{r}}\,|\ \rangle = 0 \ , \qquad \text{(III.4)}$$

$$[a^{\dagger}_{r\hat{r}}\ ,\ a^{\dagger}_{s\hat{s}}]_{+} = 0 = [a_{r\hat{r}}\ ,\ a_{s\hat{s}}]_{+} \qquad \text{(III.5)}$$

e

$$[a_{r\hat{r}}\ ,\ a^{\dagger}_{s\hat{s}}]_{+} = \delta_{rs}\,\delta_{\hat{r}\hat{s}} \ . \qquad \text{(III.6)}$$

Os dois membros de (III.3) são vetores em espaços distintos, e a igualdade deve ser interpretada como um homomorfismo.

Sendo o vácuo um tensor de ordem nula, (III.3) justifica introduzirem-se (Fre 66) os <u>tensores de criação</u>

$$A^{r}_{\hat{r}} = a^{\dagger}_{r\hat{r}} \ . \qquad \text{(III.7)}$$

Para os <u>tensores de aniquilação</u> usamos a conjugação covariante, definindo-os como

$$B^{r}_{\hat{r}} = \sigma\ \overline{A}^{r}_{\hat{r}} \ , \qquad \text{(III.8)}$$

onde

$$\sigma = (-)^{2r} = (-)^{2s} = \ldots \qquad \text{(III.9)}$$

é o <u>sinal da representação</u> e não depende do particular orbital. Desse modo, pela equação (II.24),

$$\overline{B}^{r} = A^{r} \tag{III.10}$$

e, pela equação (II.23),

$$a_{r\hat{r}} = (-)^{r-\hat{r}}\ B^{r}_{-\hat{r}} \ . \tag{III.11}$$

Em termos desses tensores, (III.6) escreve-se

$$[(A^{r}_{\hat{r}})^{\dagger}, A^{s}_{\hat{s}}]_{+} = \delta_{rs}\,\delta_{\hat{r}\hat{s}} \tag{III.12}$$

Esta é uma forma invariante do tipo (II.107) e concluimos, com a ajuda de (II.109), que

$$[\overline{A}^{r}, A^{s}]^{\nu}_{+} = \delta_{0\nu}\,\delta_{rs}\,[r]^{1/2} \tag{III.13}$$

ou ainda, tomando o conjugado covariante,

$$[A^{r}, B^{s}]^{\nu}_{+} = \delta_{0\nu}\,\delta_{rs}\,[r]^{1/2} \ . \tag{III.14}$$

O operador <u>número de ocupação</u> do orbital r,

$$N_{r} = \sum_{\hat{r}} a^{\dagger}_{r\hat{r}}\, a_{r\hat{r}} \ , \tag{III.15}$$

escreve-se por sua vez, lembrando (II.56),

$$N_{r} = [r]^{1/2}\,(A^{r} B^{r})^{0} \ . \tag{III.16}$$

A correspondência entre primeira e segunda quantização para estados de n fermions é

$$A^{u}_{\hat{u}} \ldots A^{\hat{s}}_{\hat{s}} A^{r}_{\hat{r}} \mid \rangle = \sqrt{n!}\, \mathcal{A}(1,2,\ldots n)\left\{\psi^{r}_{\hat{r}}(1)\,\psi^{\hat{s}}_{\hat{s}}(2)\ldots\psi^{u}_{\hat{u}}(n)\right\}, \quad \text{(III.17)}$$

onde

$$\mathcal{A} = \frac{1}{n!}\sum_{P}(-)^{P}\,P \quad \text{(III.18)}$$

é o operador de anti-simetrização, com P representando as possíveis permutações de 1,2,...n. Mostra-se facilmente que $\mathcal{A}$ é um projetor, isto é,

$$\mathcal{A}^{\dagger} = \mathcal{A} = \mathcal{A}^{2} \quad \text{(III.19)}$$

e, portanto, que o estado no segundo membro de (III.17) é normalizado. Se introduzirmos algum esquema de acoplamento tensorial em (III.17) e novamente normalizarmos ambos os membros obteremos

$$Z^{\Gamma}_{rs\ldots u} \mid \rangle = \psi^{\Gamma}_{rs\ldots u}(1,2,\ldots n) \quad , \quad \text{(III.20)}$$

onde $Z^{\Gamma}_{rs\ldots u}$ é uma certa forma acoplada nos argumentos A^{r}, $A^{s},\ldots A^{u}$ denominada <u>operador de estado</u>. Para duas partículas, por exemplo, temos (Fre 66)

$$Z^{\Gamma}_{rs} = \zeta_{rs}\,(A^{r}A^{s})^{\Gamma} \quad , \quad \text{(III.21)}$$

com a notação

$$\zeta_{rs} = \frac{1}{\sqrt{1+\delta_{rs}}} \quad . \quad \text{(III.22)}$$

Para o conjugado covariante de (III.21) obtém-se, usando-se (III.5),

$$\bar{\bar{Z}}^{\Gamma}_{rs} = \zeta_{rs} \left(B^r B^s\right)^{\Gamma} . \qquad \text{(III.23)}$$

Em geral, qualquer que seja o estado anti-simetrizado e normalizado $\psi^{\Gamma}_{x}(1,2,..,n)$, definimos o correspondente operador de estado por (Fre 66; Fre+69)

$$Z^{\Gamma}_{x}(n) \mid \rangle = \psi^{\Gamma}_{x}(1,2,\ldots n) . \qquad \text{(III.24)}$$

Lembrando que os $\mathcal{A}$ são projetores e que

$$\mathcal{A}(1,2,\ldots n+m) = \mathcal{A}(1,2,\ldots n+m)\,\mathcal{A}(1,2,\ldots n)\,\mathcal{A}(n+1,n+2,\ldots n+m) , \qquad \text{(III.25)}$$

não é difícil mostrar que

$$Z^{\wedge}_{y}(m) Z^{\Gamma}_{x}(n) \mid \rangle = \sqrt{\frac{(n+m)!}{n!\,m!}}\,\mathcal{A}(1,2,\ldots n+m)\left\{\psi^{\Gamma}_{x}(1,2,\ldots n)\,\psi^{\wedge}_{y}(n+1,n+2,\ldots n+m)\right\} . \qquad \text{(III.26)}$$

Duas grandezas importantes são a densidade de uma partícula

$$\rho_r = \frac{N_r}{[r]} = [r]^{-1/2} \left(A^r B^r\right)^{0} , \qquad \text{(III.27)}$$

e a densidade de duas partículas(*)

$$\Gamma^{(\wedge)}_{rstu} = [\wedge]^{-1/2} \left(Z^{\wedge}_{tu}\,\bar{\bar{Z}}^{\wedge}_{rs}\right)^{0} . \qquad \text{(III.28)}$$

Se ψ^{0} é um estado com ordem tensorial nula, (II.109)

(*) Colocamos parênteses em índices superiores quando eles não representam as ordens tensoriais das respectivas grandezas.

nos diz que

$$\langle \psi^0 | \rho_r | \psi^0 \rangle = \langle \psi^0 | a^{\dagger}_{r\hat{r}} \, a_{r\hat{r}} | \psi^0 \rangle \qquad \text{(III.29)}$$

e

$$\langle \psi^0 | \Gamma^{(\wedge)}_{rs\,tu} | \psi^0 \rangle = \langle \psi^0 | Z^{\wedge}_{tu\hat{\lambda}} \left(Z^{\wedge}_{rs\hat{\lambda}} \right)^{\dagger} | \psi^0 \rangle \,, \qquad \text{(III.30)}$$

sendo irrelevante em ambos os casos o índice de projeção escolhido.

Consideremos finalmente a hamiltoniana H, nos limitando ao caso em que tanto o termo de um corpo K como a interação de dois corpos V são tensores de ordem nula. Então, partindo-se de sua expressão usual em segunda quantização e usando-se alguns resultados da seção II-7, obtém-se (Fre 66)

$$H = K + V \qquad \text{(III.31)}$$

com

$$K = \sum_r e_r \, N_r \qquad \text{(III.32)}$$

e

$$V = \sum_{\substack{rstu:\Omega \\ (r\leq s,\, t\leq u)}} [\Omega]^{1/2} \, W^{(\Omega)}_{rs\,tu} \left(Z^{\Omega}_{rs} \, \overline{Z}^{\Omega}_{tu} \right)^0 \,, \qquad \text{(III.33)}$$

onde e_r é a energia de partícula-única para o orbital r e

$$W^{(\Omega)}_{rs\,tu} = \langle (rs)\Omega\hat{\Omega} \,|\, V \,|\, (tu)\Omega\hat{\Omega} \rangle \qquad \text{(III.34)}$$

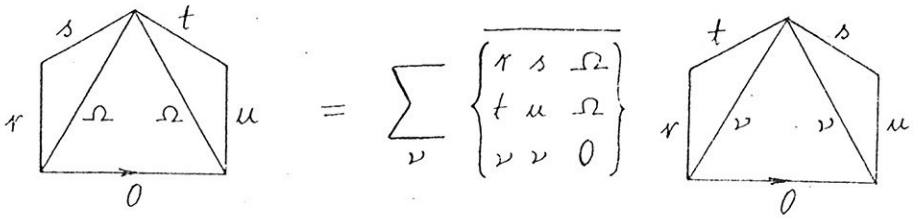
(independente de $\hat{\Omega}$) é o elemento de matriz da interação entre estados normalizados e anti-simetrizados, satisfazendo, portanto, a propriedade de simetria

$$W^{(\Omega)}_{rs\,tu} = -(-)^{t+u-\Omega} \, W^{(\Omega)}_{rs\,ut} \,. \qquad \text{(III.35)}$$

Será instrutivo colocarmos (III.33) em forma multipolar (Fre 66). Para isso comecemos pela identidade

$$A^r_{\hat{r}} A^s_{\hat{s}} B^t_{\hat{t}} B^u_{\hat{u}} = -A^r_{\hat{r}} B^t_{\hat{t}} A^s_{\hat{s}} B^u_{\hat{u}} + A^r_{\hat{r}} [A^s_{\hat{s}}, B^t_{\hat{t}}]_+ B^u_{\hat{u}} , \qquad \text{(III.36)}$$

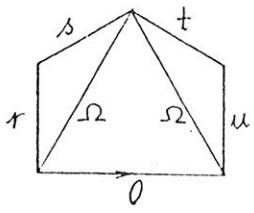
acoplemos tensorialmente o primeiro membro no esquema apropriado e efetuemos os reacoplamentos



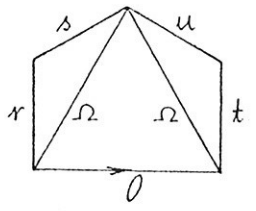
$$= \sum_{\nu} \overline{\begin{Bmatrix} r & s & \Omega \\ t & u & \Omega \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix}}$$

(III.37)

e

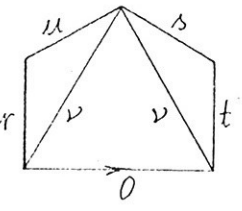


$$= (-)^{t+u-\Omega}$$



(III.38)

$$= (-)^{t+u-\Omega} \sum_{\nu} \overline{\begin{Bmatrix} r & s & \Omega \\ u & t & \Omega \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix}}$$



respectivamente, no primeiro e no segundo termo do seu segundo membro. Obtemos então, usando (III.14),

$$((A^r A^s)^{\Omega} (B^t B^u)^{\Omega})^0 = -\sum_{\nu} \overline{\begin{Bmatrix} r & s & \Omega \\ t & u & \Omega \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix}} ((A^r B^t)^{\nu} (A^s B^u)^{\nu})^0 \qquad \text{(III.39)}$$

$$+ (-)^{t+u-\Omega} \delta_{st} [s]^{1/2} \overline{\begin{Bmatrix} r & s & \Omega \\ u & t & \Omega \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix}} (A^r B^u)^0$$

e, introduzindo esse resultado em (III.33),

$$V = \sum_{\substack{rtsu:\nu \\ (r\le s,\, t\le u)}} \delta_{rs}\,\delta_{tu}\,\beta^{(\nu)}_{rtsu}\,\left((A^r B^t)^\nu (A^s B^u)^\nu\right)^0$$

$$+ \sum_{\substack{rsu \\ (r\le s\le u)}} \delta_{rs}\,\delta_{su}\,\beta^{(0)}_{rusu}\,\left(A^r B^u\right)^0 \quad , \tag{III.40}$$

com os parâmetros $\beta^{(\nu)}_{rtsu}$ dados por

$$\beta^{(\nu)}_{rtsu} = \sum_{\Omega} [\Omega]^{1/2} \begin{Bmatrix} r & s & \Omega \\ t & u & \Omega \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix} W^{(\Omega)}_{rstu} \quad . \tag{III.41}$$

Para nós (ver seção VI-3) é mais conveniente definir a <u>interação multipolar</u> como sendo

$$F^{(\nu)}_{abcd} = 2\,\frac{\delta_{ab}\,\delta_{cd}}{\delta_{ac}\,\delta_{bd}}\,[\nu]^{-1/2}\,\beta^{(\nu)}_{abcd} \quad . \tag{III.42}$$

Ela satisfaz as seguintes propriedades de simetria, facilmente demonstráveis(*):

$$F^{(\nu)}_{abcd} = F^{(\nu)}_{cdab} \tag{III.43}$$

e

$$F^{(\nu)}_{abcd} = (-)^{a+b+c+d}\,F^{(\nu)\,*}_{badc} \quad . \tag{III.44}$$

(*) Em (III.44) e nas equações do restante desta tese, embora mantenhamos os sinais de conjugação complexa, eles podem ser ignorados desde que se adote, como é usual, uma convenção de fases que faça reais os elementos de matriz $W^{(\Omega)}_{abcd}$.

Lembrando (II.103), temos ainda, para a parte monopolar de (III.42),

$$F^{(0)}_{aa\,cc} = [a\,c]^{1/2}\, W_{ac}\,, \tag{III.45}$$

onde

$$W_{ac} = W_{ca} = \frac{1+\delta_{ac}}{[ac]} \sum_{\Omega} [\Omega]\, W^{(\Omega)}_{ac\,ac}$$

$$= \frac{1+\delta_{ac}}{[a\,c]} \sum_{\Omega\hat{\Omega}} \langle (ac)\Omega\hat{\Omega}\,|\,V\,|\,(ac)\Omega\hat{\Omega}\rangle \tag{III.46}$$

é essencialmente a energia de interação média entre uma partícula no orbital a e outra no orbital c. (Para a=c essa interpretação não é totalmente correta devido ao princípio de Pauli (Fre 66)).

III-3) SÍMBOLOS DE ANTI-SIMETRIZAÇÃO

As expressões para comutadores e, especialmente, duplos-comutadores envolvendo operadores de estado e similares no formalismo de segunda quantização contêm, em geral, muitos termos. Frequentemente, no entanto, alguns destes termos estão relacionados entre si por mera permutação de rótulos referentes aos estados de partícula-única. Portanto é possível, conforme veremos nas seções seguintes, agrupá-los convenientemente, introduzindo os <u>símbolos de anti-simetrização</u> ϕ_{ab}, definidos por

$$\oint_{ab} F(ab) = F(ab) - F(ba) \,, \qquad \text{(III.47)}$$

onde F(ab) é qualquer expressão envolvendo os índices a e b. Demonstram-se facilmente as seguintes propriedades:

$$\oint_{ab} = \oint_{ba} \,, \qquad \text{(III.48)}$$

$$\oint_{ab} F(ab) = - \oint_{ba} F(ba) \qquad \text{(III.49)}$$

e

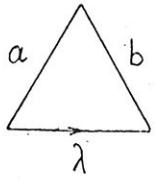
$$\oint_{ab} \oint_{cd} = \oint_{cd} \oint_{ab} \,, \qquad \text{(III.50)}$$

supondo-se na última que os quatro índices são distintos(*).

Os índices a e b podem ser múltiplos, incluindo, por exemplo, índices de ordem tensorial e de projeção. Nesse caso, (III.47) poderia ser escrita, mais explicitamente, na forma

$$\oint_{a\hat{a},\,b\hat{b}} F(a\hat{a},b\hat{b}) = F(a\hat{a},b\hat{b}) - F(b\hat{b},a\hat{a}) \,. \qquad \text{(III.51)}$$

Suponha agora que fosse introduzido acima algum esquema de acoplamento contendo



(III.52)

(*) Em expressões envolvendo símbolos de anti-simetrização deve-se supor que índices denotados por letras distintas são distintos. Para obter as expressões correspondentes em que alguns desses índices tomam valores iguais, deve-se primeiro expandir aqueles símbolos na expressão original, igualando depois os índices.

Apareceria, então, a soma

$$\ldots \sum_{\hat{a}\hat{b}} C^{a\,b\,\lambda}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\lambda}} \oint_{a\hat{a},b\hat{b}} F(a\hat{a},b\hat{b})$$

$$= \ldots \sum_{\hat{a}\hat{b}} C^{a\,b\,\lambda}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\lambda}} \left[F(a\hat{a},b\hat{b}) - F(b\hat{b},a\hat{a}) \right] . \qquad \text{(III.53)}$$

Com a notação

$$F(ab:\lambda\hat{\lambda}) = \sum_{\hat{a}\hat{b}} C^{a\,b\,\lambda}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\lambda}} F(a\hat{a},b\hat{b}) \quad , \qquad \text{(III.54)}$$

poderíamos reescrevê-la na forma

$$\ldots \sum_{\hat{a}\hat{b}} C^{a\,b\,\lambda}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\lambda}} \oint_{a\hat{a};b\hat{b}} F(a\hat{a},b\hat{b})$$

$$= \ldots F(ab:\lambda\hat{\lambda}) - \ldots (-)^{a+b-\lambda} F(ba:\lambda\hat{\lambda}) \quad , \qquad \text{(III.55)}$$

o sinal $(-)^{a+b-\lambda}$ devendo-se à propriedade (II.53). Isso sugere definirmos o novo símbolo de anti-simetrização $\oint_{ab\lambda}$, tal que

$$\oint_{ab\lambda} F(ab) = F(ab) - (-)^{a+b-\lambda} F(ba) \qquad \text{(III.56)}$$

para qualquer expressão F(ab) envolvendo os índices a e b e em termos do qual a equação anterior fica

$$\ldots \sum_{\hat{a}\hat{b}} C^{a\,b\,\lambda}_{\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{\lambda}} \oint_{a\hat{a},b\hat{b}} F(a\hat{a},b\hat{b}) = \ldots \oint_{ab\lambda} F(ab:\lambda\hat{\lambda}) \; . \qquad \text{(III.57)}$$

Em resumo: com a introdução de qualquer esquema de acoplamento contendo (III.52), o símbolo $\oint_{a\hat{a},b\hat{b}}$ transforma-se em $\oint_{ab\lambda}$, ou seja,

$$\oint_{a\hat{a},b\hat{b}} \xrightarrow{\quad \text{(a, b, } \lambda\text{)} \quad} \oint_{ab\lambda} \; . \qquad \text{(III.58)}$$

Para os novos símbolos valem as seguintes propriedades análogas a (III.48,49,50):

$$\oint_{ab\lambda} = \oint_{ba\lambda} \quad , \tag{III.59}$$

$$\oint_{ab\lambda} F(ab) = -(-)^{a+b-\lambda} \oint_{ba\lambda} F(ba) \tag{III.60}$$

e

$$\oint_{ab\lambda} \oint_{cd\nu} = \oint_{cd\nu} \oint_{ab\lambda} \quad . \tag{III.61}$$

Ocorrem certas simplificações quando esses símbolos são aplicados a expressões com simetrias bem definidas. Com efeito, sejam

$$S(ab) = S(ba) \quad , \tag{III.62}$$

$$S(ab\lambda) = (-)^{a+b-\lambda} S(ba\lambda) \quad , \tag{III.63}$$

$$A(ab) = -A(ba) \tag{III.64}$$

e

$$A(ab\lambda) = -(-)^{a+b-\lambda} A(ba\lambda) \quad ; \tag{III.65}$$

então:

$$\oint_{ab\lambda} S(ab) = [1-(-)^{a+b-\lambda}]\, S(ab) \quad , \tag{III.66}$$

$$\oint_{ab\lambda} S(ab)\, F(ab) = S(ab) \oint_{ab\lambda} F(ab) \quad , \tag{III.67}$$

$$\oint_{ab\lambda} S(ab\lambda) = 0 \quad , \tag{III.68}$$

$$\oint_{ab\lambda} S(ab\lambda)\, F(ab) = S(ab\lambda) \oint_{ab} F(ab) \quad , \tag{III.69}$$

$$\oint_{ab\lambda} A(ab) = [1+(-)^{a+b-\lambda}]\, A(ab) \quad , \tag{III.70}$$

$$\oint_{ab\lambda} A(ab)F(ab) = A(ab)\left[F(ab) + (-)^{a+b-\lambda} F(ba)\right] , \qquad \text{(III.71)}$$

$$\oint_{ab\lambda} A(ab\lambda) = 2\, A(ab\lambda) \qquad \text{(III.72)}$$

e

$$\oint_{ab\lambda} A(ab\lambda)F(ab) = A(ab\lambda)\left[F(ab) + F(ba)\right] . \qquad \text{(III.73)}$$

Antes de prosseguir, introduzamos a função numérica, que será útil mais adiante,

$$\ell_{ab\lambda} = 1 - \delta_{ab}(-)^{a+b-\lambda} , \qquad \text{(III.74)}$$

cujos valores possíveis são 0, 1 e 2. Se a, b e λ satisfazem a regra triangular, então

$$\zeta_{ab}^{2}\,\ell_{ab\lambda} = \begin{cases} 1 \text{ se a configuração } \triangle(a,b,\lambda) \text{ é permitida para fermions e} \\ \\ 0 \text{ se a configuração } \triangle(a,b,\lambda) \text{ é proibida para fermions,} \end{cases} \qquad \text{(III.75)}$$

com ζ_{ab} dado por (III.22).

As seguintes propriedades são úteis quando os símbolos de anti-simetrização aparecem em combinação com deltas de Kronecker:

$$\oint_{aa\lambda} = \ell_{aa\lambda} , \qquad \text{(III.76)}$$

$$\oint_{ab\lambda}\,\delta_{ab} = \ell_{ab\lambda}\,\delta_{ab} , \qquad \text{(III.77)}$$

$$\oint_{ab\lambda}\,\delta_{ab}F(ab) = \ell_{aa\lambda}\,\delta_{ab}F(ab) , \qquad \text{(III.78)}$$

$$\oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} = \oint_{cd\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} \,, \tag{III.79}$$

$$\oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(abcd) = F(cdcd) \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} \,, \tag{III.80}$$

$$\oint_{ab\lambda} \oint_{cd\nu} \delta_{ac}\,\delta_{bd} = [1 + (-)^{\lambda-\nu}] \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} \tag{III.81}$$

e

$$\oint_{ab\lambda} \oint_{cd\nu} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(abcd) = [F(cdcd) + (-)^{\lambda-\nu} F(dcdc)] \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} \,. \tag{III.82}$$

Note-se que certas manipulações sugeridas pelos deltas de Kronecker, como

$$\oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(abcd) = \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(cdcd) = \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(abab)$$

são válidas, enquanto outras não. Por exemplo, em geral

$$\oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(abcd) \neq \oint_{cd\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd}\, F(abcd)$$

e

$$F(abcd) \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} \neq F(cdcd) \oint_{ab\lambda} \delta_{ac}\,\delta_{bd} \,,$$

sendo a diferença entre o primeiro e o segundo membro dessas desigualdades

$$(-)^{a+b-\lambda}\, \delta_{ad}\,\delta_{bc} \{F(abab) - F(baba)\}$$

e

$$(-)^{a+b-\lambda}\, \delta_{ad}\,\delta_{bc} \{F(cdcd) - F(dcdc)\}$$

respectivamente.

Fixemos, agora, uma ordem particular para os índices, por exemplo:

$$a \leq b \qquad \text{e} \qquad c \leq d \,. \tag{III.83}$$

Nesse caso

$$\delta_{bc}\,\delta_{ad} = \delta_{ab}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd} \qquad \text{(III.84)}$$

e, portanto,

$$\oint_{ab\lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd} = \ell_{ab\lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,, \qquad \text{(III.85)}$$

$$\oint_{ab\lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,F(abcd) = F(cdcd)\,\ell_{ab\lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,, \qquad \text{(III.86)}$$

$$\oint_{ab\lambda}\oint_{cd\nu}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd} = \left[1+(-)^{\lambda-\nu}\right]\ell_{ab\lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd} \qquad \text{(III.87)}$$

e

$$\oint_{ab\lambda}\oint_{cd\nu}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,F(abcd) = \qquad \text{(III.88)}$$

$$\left[F(cdcd)+(-)^{\lambda-\nu}F(dcdc)\right]\ell_{ab\lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,.$$

Quanto ao ordenamento de índices, convém chamar a atenção para um ponto que poderia, inadvertidamente, levar a erros. Se F(ab) = G(ab) para $a\leqslant b$, não se pode concluir que $\oint_{ab\lambda} F(ab) = \oint_{ab\lambda} G(ab)$ para $a\leqslant b$, devido à assimetria do domínio de validade ($a\leqslant b$) da primeira igualdade. Um possível tipo de erro seria supor que (III.86), válida somente no domínio (III.83), justificasse a substituição de

$$\oint_{ab\lambda}\oint_{cd\nu}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,F(abcd)$$

por

$$\ell_{ab\lambda}\,\ell_{cd\nu}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,F(abab)\,,$$

o que não é verdade, como se vê em (III.88).

III-4) COMUTADORES DIRETOS

Usaremos aqui uma notação análoga à da seção III-2, rotulando os estados de partícula-única com letras minúsculas

do alfabeto romano. Entretanto, como vamos considerar o caso mais geral, em que os estados não têm necessariamente ordem tensorial bem definida, usaremos índices inferiores e o operador de criação de um fermion no estado a será denotado por A_a. Definiremos o operador de aniquilação B_a por

$$\overline{B}_a = A_a \,, \tag{III.89}$$

onde a barra indica conjugação covariante. Tem-se, também,

$$\overline{A}_a = \sigma B_a \,, \tag{III.90}$$

onde σ é o sinal da representação (+1 para nêutrons ou prótons separadamente e -1 para núcleons num formalismo com isospin, conforme (III.9)) e, portanto,

$$\sigma^2 = 1 \,. \tag{III.91}$$

Para o cálculo dos comutadores usaremos o teorema de Wick, denotando a contração de dois operadores, ou seja, o valor de espera do seu produto no vácuo, por

$$\langle B_a A_b \rangle \,, \tag{III.92}$$

tendo-se sempre

$$\langle A_a B_b \rangle = 0 \,. \tag{III.93}$$

Todas as fórmulas serão deixadas explicitamente em termos das contrações, de modo que tenhamos igualdades entre formas multilineares (seção II-3) nos mesmos argumentos, facilitando a

a posterior introdução do acoplamento tensorial. Antes de passarmos adiante, mencionemos que todas as igualdades desta seção permaneceriam válidas se substituíssemos a conjugação covariante pela hermitiana e σ pela unidade.

Os resultados para os comutadores que nos interessam são os seguintes:

$$[A_a B_b , A_c A_d] = - \phi_{cd} \; A_a A_c \langle B_b A_d \rangle \quad , \tag{III.94}$$

$$[B_a B_b , A_c B_d] = - \phi_{ab} \langle B_a A_c \rangle B_b B_d \quad , \tag{III.95}$$

$$[B_a B_b , A_c A_d] = - \phi_{ab} \langle B_a A_c \rangle \langle B_b A_d \rangle + \phi_{ab} \phi_{cd} \; A_c B_a \langle B_b A_d \rangle \quad , \tag{III.96}$$

$$[B_a B_b , A_c B_d , A_e A_f] = - \tfrac{1}{2} \phi_{ab} \langle B_a A_c \rangle [B_b B_d , A_e A_f] - \tfrac{1}{2} \phi_{ef} [B_a B_b , A_c A_e] \langle B_d A_f \rangle \tag{III.97}$$

e

$$\begin{aligned}
[B_a B_b , A_c A_d B_e B_f , A_g A_h] = \; & \phi_{cd} \phi_{ef} \langle B_a A_c \rangle \langle B_b A_d \rangle \langle B_e A_g \rangle \langle B_f A_h \rangle \\
& - \phi_{cd} \phi_{ef} \phi_{gh} \langle B_a A_c \rangle \langle B_b A_d \rangle A_g B_e \langle B_f A_h \rangle \\
& - \phi_{ab} \phi_{cd} \phi_{ef} \langle B_a A_c \rangle A_d B_b \langle B_e A_g \rangle \langle B_f A_h \rangle \\
& + \phi_{ab} \phi_{cd} \phi_{ef} \phi_{gh} \; A_c B_a \langle B_b A_d \rangle A_g B_e \langle B_f A_h \rangle \\
& + \tfrac{1}{2} \phi_{ab} \phi_{ef} \phi_{gh} \langle B_a A_g \rangle \langle B_f A_h \rangle A_c A_d B_e B_b \\
& + \tfrac{1}{2} \phi_{ab} \phi_{cd} \phi_{gh} \langle B_a A_g \rangle \langle B_b A_c \rangle A_h A_d B_e B_f \; .
\end{aligned} \tag{III.98}$$

O termo em ABAB, acima, pode ser colocado em ordem normal, obtendo-se

$$\phi_{ab}\,\phi_{cd}\,\phi_{ef}\,\phi_{gh}\,\langle B_b A_d\rangle\, A_c B_e\,\langle B_a A_g\rangle\langle B_f A_h\rangle$$

$$+\ \phi_{ab}\,\phi_{cd}\,\phi_{ef}\,\phi_{gh}\ A_g A_d\ \ B_b\ B_e\langle B_a A_c\rangle\langle B_f A_h\rangle\ . \qquad \text{(III.99)}$$

III-5) COMUTADORES ACOPLADOS

Se os estados de partícula-única têm ordem tensorial bem definida, os rótulos correspondentes contêm índices de ordem tensorial e de projeção. No modelo de camadas esférico sem isospin, por exemplo, $a=n_a l_a j_a$ e $\hat{a}=m_a$. Podemos fazer a correspondência com a seção anterior como segue:

$$\begin{aligned} a &\longrightarrow a\,\hat{a} \\ A_a &\longrightarrow A^a_{\hat{a}} \\ B_a &\longrightarrow B^a_{\hat{a}}\ . \end{aligned} \qquad \text{(III.100)}$$

Lembrando ainda que, por definição, contrações são formas invariantes, temos (II.105),

$$\langle (B^a A^b)^\nu\rangle = \delta_{0\nu}\,\langle (B^a A^b)^0\rangle\ . \qquad \text{(III.101)}$$

Por outro lado, em vista de (III.90) e (II.109),

$$\langle (B^a A^b)^0\rangle = \sigma\,\langle (\bar{A}^a A^b)^0\rangle = \sigma\,[a]^{1/2}\langle (A^a_{\hat{a}})^\dagger A^b_{\hat{b}}\rangle_{\hat{a}=\hat{b}}\ ,$$

mas

$$\langle (A^a_{\hat{a}})^\dagger A^b_{\hat{b}}\rangle = \delta_{ab}\,\delta_{\hat{a}\hat{b}} \qquad \text{(III.102)}$$

e, portanto,

$$\langle (B^a A^b)^\nu \rangle = \sigma \, \delta_{0\nu} \, \delta_{ab} \, [a]^{1/2} . \qquad \text{(III.103)}$$

É conveniente ter os comutadores da seção anterior em forma acoplada. Basta, para isso, introduzir o esquema de acoplamento apropriado, usando no segundo membro as técnicas de reacoplamento desenvolvidas no capítulo II e a propriedade (III.58) dos símbolos de anti-simetrização. Obtêm-se:

$$\left[(A^a B^b)^\alpha, (A^c A^d)^\beta\right]^\Gamma = -\sigma [\alpha\beta]^{1/2} \oint_{cd\beta} \delta_{bd} \begin{Bmatrix} \alpha & a & b \\ \beta & c & b \\ \Gamma & \Gamma & 0 \end{Bmatrix}' (A^a A^c)^\Gamma , \qquad \text{(III.104)}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, (A^c B^d)^\beta\right]^\Gamma = -\sigma [\alpha\beta]^{1/2} \oint_{ab\alpha} \delta_{ac} \begin{Bmatrix} b & \alpha & a \\ d & \beta & a \\ \Gamma & \Gamma & 0 \end{Bmatrix}' (B^b B^d)^\Gamma , \qquad \text{(III.105)}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, (A^c A^d)^\beta\right]^\Gamma = -[\alpha]^{1/2} \oint_{ab\alpha} \delta_{ac} \, \delta_{bd} \, \delta_{\alpha\beta} \, \delta_{0\Gamma}$$
$$+ (-)^{\alpha+\beta-\Gamma} [\alpha\beta]^{1/2} \oint_{ab\alpha} \oint_{cd\beta} \delta_{bd} \begin{Bmatrix} a & \alpha & b \\ c & \beta & b \\ \Gamma & \Gamma & 0 \end{Bmatrix}' (A^c B^a)^\Gamma , \qquad \text{(III.106)}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, (A^c B^d)^0, (A^e A^f)^\beta\right]^\Gamma =$$

$$\frac{1}{2} \delta^{cd} [c]^{-1/2} \left\{ \oint_{ab\alpha} \delta_{ca} \left[(B^d B^b)^\alpha, (A^e A^f)^\beta\right]^\Gamma \right.$$

$$\left. + \oint_{ef\beta} \delta_{df} \left[(B^a B^b)^\alpha, (A^e A^c)^\beta\right]^\Gamma \right\} \qquad \text{(III.107)}$$

e

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, ((A^c A^d)^\beta (B^e B^f)^\beta)^0, (A^g A^h)^\gamma\right]^\Gamma =$$

$$\delta_{0\Gamma}\,\delta_{\alpha\beta}\,\delta_{\beta\gamma}\,\phi_{cd\beta}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,\phi_{ef\beta}\,\delta_{eg}\,\delta_{fh}$$

$$-(-)^{\alpha+\gamma+\Gamma}\delta_{\alpha\beta}[\gamma]^{1/2}\phi_{cd\beta}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\,\phi_{ef\beta}\,\phi_{gh\gamma}\,\delta_{fh}\begin{Bmatrix}\gamma & g & h\\ \alpha & e & h\\ \Gamma & \Gamma & 0\end{Bmatrix}'(A^g B^e)^\Gamma$$

$$-(-)^{\alpha+\gamma+\Gamma}\delta_{\gamma\beta}[\alpha]^{1/2}\phi_{ef\beta}\,\delta_{eg}\,\delta_{fh}\,\phi_{ab\alpha}\,\phi_{cd\beta}\,\delta_{ac}\begin{Bmatrix}d & \gamma & a\\ b & \alpha & a\\ \Gamma & \Gamma & 0\end{Bmatrix}'(A^d B^b)^\Gamma$$

$$+(-)^{\alpha+\gamma+\Gamma}[\alpha\beta\gamma]^{1/2}\phi_{ab\alpha}\,\phi_{cd\beta}\,\phi_{ef\beta}\,\phi_{gh\gamma}\,\delta_{bd}\,\delta_{fh}$$
$$\sum_{\omega\omega'}[\omega\omega']^{1/2}\begin{Bmatrix}\Gamma & \gamma & \alpha\\ \omega & \beta & \alpha\\ \omega' & \omega' & 0\end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix}\beta & c & d\\ \alpha & a & b\\ \omega & \omega & 0\end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix}\gamma & g & h\\ \beta & e & f\\ \omega' & \omega' & 0\end{Bmatrix}'((A^c B^a)^\omega (A^g B^e)^{\omega'})^\Gamma$$

$$+\frac{1}{2}\phi_{ab\alpha}\,\phi_{ef\beta}\,\phi_{gh\gamma}\,\delta_{ag}\,\delta_{fh}\begin{Bmatrix}b & \alpha & a\\ h & \gamma & a\\ \Gamma & \Gamma & 0\end{Bmatrix}'\sum_\nu(-)^{\beta+\Gamma-\nu}[\alpha\gamma\nu]^{1/2}\begin{Bmatrix}\beta & e & f\\ \Gamma & b & f\\ \nu & \nu & 0\end{Bmatrix}'((A^c A^d)^\beta (B^e B^b)^\nu)^\Gamma$$

$$+\frac{1}{2}\phi_{ab\alpha}\,\phi_{cd\beta}\,\phi_{gh\gamma}\,\delta_{ag}\,\delta_{bc}\begin{Bmatrix}b & \alpha & a\\ h & \gamma & a\\ \Gamma & \Gamma & 0\end{Bmatrix}'\sum_\nu(-)^{\beta+\Gamma-\nu}[\alpha\gamma\nu]^{1/2}\begin{Bmatrix}\beta & d & b\\ \Gamma & h & b\\ \nu & \nu & 0\end{Bmatrix}'((A^h A^d)^\nu (B^e B^f)^\nu)^\Gamma \quad \text{(III.108)}$$

O termo em ABAB acima, colocado em ordem normal, fica

$$[\alpha\beta\gamma]^{1/2}\phi_{ab\alpha}\,\phi_{cd\beta}\,\phi_{ef\beta}\,\phi_{gh\alpha}\begin{Bmatrix}c & d & \beta\\ e & f & \beta\\ \Gamma & \Gamma & 0\end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix}b & \alpha & a\\ h & \gamma & a\\ \Gamma & \Gamma & 0\end{Bmatrix}'\delta_{bg}\,\delta_{ag}\,\delta_{fh}\,(A^c B^e)^\Gamma$$

$$+\sigma(-)^{\alpha+\gamma+\Gamma}[\alpha\beta\Gamma]^{1/2}\phi_{ab\alpha}\,\phi_{cd\beta}\,\phi_{ef\beta}\,\phi_{gh\gamma}\,\delta_{ac}\,\delta_{fh}$$

$$\sum_{\omega\nu\nu'}[\omega^2\nu\nu']^{1/2}\begin{Bmatrix}c & d & \beta\\ e & f & \beta\\ \omega & \omega & 0\end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix}\nu & \nu' & \Gamma\\ \gamma & \alpha & \Gamma\\ \omega & \omega & 0\end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix}b & \alpha & a\\ e & \omega & a\\ \nu' & \nu' & 0\end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix}\gamma & g & h\\ \omega & d & h\\ \nu & \nu & 0\end{Bmatrix}'((A^g A^d)^\nu (B^b B^e)^{\nu'})^\Gamma .$$

(III.109)

Lembrando que o operador número de ocupação é dado por (III.16), temos ainda, como um caso particular de (III.107),

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, N_c, (A^e A^f)^\beta\right]^\Gamma = \frac{1}{2}\left(\delta_{ac}+\delta_{bc}+\delta_{ec}+\delta_{fc}\right)\left[(B^a B^b)^\alpha, (A^e A^f)^\beta\right]^\Gamma , \qquad \text{(III.110)}$$

onde usamos a propriedade (III.73).

Nessas equações δ^{ab} é o delta de Kronecker envolvendo apenas os índices de ordem tensorial contidos nos rótulos a e b. Introduzimos, também, o símbolo de 9j primado:

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix}' = [ef]^{1/2} \begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix} = [ef]^{-1/2} \overline{\begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix}} , \qquad \text{(III.111)}$$

que permite escrever mais compactamente as equações. Tem-se ainda

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix}' = W(ebcf:ad) \qquad \text{(III.112)}$$

e

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix}' = \begin{Bmatrix} a & e & b \\ f & d & b \\ c & c & 0 \end{Bmatrix}' = (-)^{e+f-a-d} \begin{Bmatrix} e & b & a \\ c & f & a \\ d & d & 0 \end{Bmatrix}' . \qquad \text{(III.113)}$$

III-6) COMUTADORES ESPECIAIS

Embora os comutadores da seção anterior sejam necessários para equações de movimento com estados-pai de ordem tensorial não-nula, para as da seção IV-5 bastam alguns casos especiais. As expressões, que ficam um pouco mais simples, estão reproduzidas abaixo:

$$\left[N_a, (A^c A^d)^\beta\right]^\beta = (\delta_{ac} + \delta_{ad})\,(A^c A^d)^\beta\,, \tag{III.114}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, N_c\right]^\alpha = (\delta_{ac} + \delta_{bc})\,(B^a B^b)^\alpha\,, \tag{III.115}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, (A^c A^d)^\alpha\right]^0 = -[\alpha]^{1/2}\, \oint_{a\,b\,\alpha}\, \delta_{ac}\, \delta_{bd}$$

$$+\,[\alpha]^{1/2} \oint_{a\,b\,\alpha} \oint_{c\,d\,\beta}\, \delta^{ac}\, \delta_{bd}\, \frac{(A^c B^a)^0}{[a]^{1/2}}\,, \tag{III.116}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, N_c, (A^e A^f)^\alpha\right]^0 = \frac{1}{2}(\delta_{ac}+\delta_{bc}+\delta_{ce}+\delta_{cf})\left[(B^a B^b)^\alpha, (A^e A^f)^\alpha\right]^0, \tag{III.117}$$

$$\left[(B^a B^b)^\alpha, ((A^c A^d)^\beta (B^e B^f)^\beta)^0\,, (A^g A^h)^\alpha\right]^0 =$$

$$\delta_{\alpha\beta} \oint_{c\,d\,\alpha} \delta_{ac}\, \delta_{bd} \oint_{e\,f\,\alpha} \delta_{ge}\, \delta_{hf}$$

$$-\,\delta_{\alpha\beta} \oint_{c\,d\,\alpha} \delta_{ac}\, \delta_{bd} \oint_{e\,f\,\alpha} \oint_{g\,h\,\alpha} \delta_{hf}\, \delta^{ge}\, \frac{(A^g B^e)^0}{[g]^{1/2}}$$

$$-\,\delta_{\alpha\beta} \oint_{e\,f\,\alpha} \delta_{eg}\, \delta_{hf} \oint_{a\,b\,\alpha} \oint_{c\,d\,\alpha} \delta_{ac}\, \delta^{bd}\, \frac{(A^d B^b)^0}{[b]^{1/2}}$$

$$+\,(-)^{\alpha+\beta}\,[\alpha\,\beta]^{1/2} \oint_{a\,b\,\alpha} \oint_{c\,d\,\beta}\, \delta_{bd} \oint_{e\,f\,\beta} \oint_{g\,h\,\alpha} \delta_{fh}$$

$$\sum_\omega{}'' (-)^\omega [\omega]^{1/2} \begin{Bmatrix} \beta & c & b \\ \alpha & a & b \\ \omega & \omega & 0 \end{Bmatrix}' \begin{Bmatrix} \alpha & g & f \\ \beta & e & f \\ \omega & \omega & 0 \end{Bmatrix}' ((A^c B^a)^\omega (A^g B^e)^\omega)^0$$

$$+\,\frac{1}{2}\,[\alpha]^{1/2} \oint_{a\,b\,\alpha} \oint_{g\,h\,\alpha} \delta_{ag}\, \delta^{bh}\, [b]^{-1}$$

$$\left\{ \oint_{e\,f\,\beta} \delta_{fh}\, ((A^c A^d)^\beta (B^e B^b)^\beta)^0 \right.$$

$$\left. +\oint_{c\,d\,\beta} \delta_{bc}\, ((A^h A^d)^\beta (B^e B^f)^\beta)^0 \right\}\,. \tag{III.118}$$

O termo em ABAB pode ser colocado em ordem normal, resultando

$$[\alpha\beta]^{1/2}\phi_{ab\alpha}\phi_{gh\alpha}\delta_{ag}\delta^{bh}\phi_{cd\beta}\phi_{ef\beta}\delta^{ce}\delta^{df}\delta_{bd}\delta_{fh}[b]^{-1}\frac{(A^cB^e)^0}{[c]^{1/2}}$$

$$-[\alpha\beta]^{1/2}\phi_{ab\alpha}\phi_{cd\beta}\delta_{ac}\phi_{ef\beta}\phi_{gh\alpha}\delta_{fh}\sum_\nu[\nu]^{1/2}\begin{Bmatrix} f & \beta & e \\ \alpha & a & b \\ g & d & \nu \end{Bmatrix}((A^jA^d)^\nu(B^eB^b)^\nu)^0 . \qquad \text{(III.119)}$$

Nessas equações supõe-se que todas as regras triangulares relevantes para que os seus primeiros membros não se anulem identicamente sejam satisfeitas. Caso contrário, seria necessário inserir fatores como $\delta(ab\alpha)$, $\delta(cd\beta)$ etc. em diversos pontos nos seus segundos membros. Foram usadas diversas propriedades dos símbolos de 9j primados, tais como

$$\begin{Bmatrix} x & y & z \\ x' & y' & z \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix}' = \begin{Bmatrix} x & x' & 0 \\ y & y' & 0 \\ z & z & 0 \end{Bmatrix}' = \frac{\delta(xyz)}{[xy]^{1/2}}\delta_{xx'}\delta_{yy'} , \qquad \text{(III.120)}$$

$$\begin{Bmatrix} x & y & z \\ 0 & z' & z \\ x' & x' & 0 \end{Bmatrix}' = \frac{\delta(xyz)}{[xz]^{1/2}}\delta_{xx'}\delta_{zz'} \qquad \text{(III.121)}$$

e

$$\sum_\omega[\omega]\begin{Bmatrix} a & d & \beta \\ e & f & \beta \\ \omega & \omega & 0 \end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix} b & \alpha & a \\ e & \omega & a \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix}'\begin{Bmatrix} \alpha & g & f \\ \omega & d & f \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix}' = (-)^{a+d+2e+f+g+2\nu+\alpha+\beta}\begin{Bmatrix} a & \alpha & b \\ d & g & \nu \\ \beta & f & e \end{Bmatrix} =$$

$$= (-)^{2a+2d+2e+2f+2g}(-)^{2\alpha+2\beta}(-)^{b+e-\nu}\begin{Bmatrix} a & \alpha & b \\ \beta & f & e \\ d & g & \nu \end{Bmatrix} = \sigma(-)^{b+e-\nu}\begin{Bmatrix} f & \beta & e \\ \alpha & a & b \\ g & d & \nu \end{Bmatrix} , \qquad \text{(III.122)}$$

esta última retirada de uma regra de soma para produtos de

três símbolos de 6j que pode ser encontrada em (ShT 63,p.518).

III-7) EXPRESSÕES PARTICULARES

As expressões da seção anterior ficam bem mais simples se escolhemos uma ordem determinada para os orbitais, por exemplo,

$$a \leq b,\ c \leq d,\ r \leq s \quad e \quad t \leq u \tag{III.123}$$

e supomos que orbitais distintos têm índices de ordem tensorial distintos, ou seja,

$$\delta^{ab} = \delta_{ab} \tag{III.124}$$

Para maior conveniência de uso nos capítulos IV e V vamos alterar alguns rótulos e dar os resultados em termos dos operadores de estado (III.21), dos seus conjugados covariantes (III.23) e dos números de ocupação (III.16). Ei-los:

$$\left[N_a, Z^{\wedge}_{tu}\right]^{\wedge} = \left(\delta_{at} + \delta_{au}\right) Z^{\wedge}_{tu}\,, \tag{III.125}$$

$$\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs}, N_a\right]^{\wedge} = \left(\delta_{ra} + \delta_{sa}\right) \bar{Z}^{\wedge}_{rs}\,, \tag{III.126}$$

$$\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs}, Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0} = [\Lambda]^{1/2} \delta_{rt}\,\delta_{su} \left(1 - \frac{N_r}{[r]} - \frac{N_s}{[s]}\right), \tag{III.127}$$

$$\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs}, N_a, Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0} = \left(\delta_{ra} + \delta_{sa}\right)\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs}, Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0}, \tag{III.128}$$

$$\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs},\left(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd}\right)^{0},Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0} =$$

$$\delta_{\wedge\Omega}\,\delta_{ra}\,\delta_{sb}\,\delta_{ct}\,\delta_{du}\left(1-\frac{N_r}{[r]}-\frac{N_s}{[s]}-\frac{N_t}{[t]}-\frac{N_u}{[u]}\right)$$

$$+[\Omega\wedge]^{1/2}\,\delta_{rt}\,\delta_{su}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd}\left\{\frac{N_a}{[ab]}\left(\delta_{rb}+\delta_{sb}\right)+\frac{N_b}{[ba]}\left(\delta_{ra}+\delta_{sa}\right)\right\}$$

$$+[\Omega\wedge]^{1/2}\,\zeta_{rs}\,\zeta_{tu}\,\zeta_{ab}\,\zeta_{cd}\,\phi_{rs\wedge}\,\phi_{ab\Omega}\,\delta_{ra}\,\phi_{cd\Omega}\,\phi_{tu\wedge}\,\delta_{du}$$

$$\cdot\sum_{\nu}[\nu]^{1/2}\begin{Bmatrix}u & \Omega & c\\ \wedge & r & s\\ t & b & \nu\end{Bmatrix}\left(Z^{\nu}_{tb}\bar{Z}^{\nu}_{cs}\right)^{0}$$

$$-\frac{1}{2}[\wedge]^{1/2}\,\delta_{rt}\,\delta_{su}\left(\frac{\delta_{ra}+\delta_{rb}+\delta_{rc}+\delta_{rd}}{[r]}+\frac{\delta_{sa}+\delta_{sb}+\delta_{sc}+\delta_{sd}}{[s]}\right)\left(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd}\right)^{0}.$$

(III.129)

No segundo membro dessa última equação, o primeiro termo provém da soma dos três primeiros em (III.118), o segundo e o terceiro provêm de (III.119) e o último corresponde ao último de (III.118).

Vejamos finalmente como ficam as equações quando todos os operadores de estado são acoplados a zero(*), o que é de interesse quando lidamos com emparelhamento. Introduzindo a notação simplificada

---

(*) As equações que seguem não dependem de (III.124).

$$Z_a = Z^0_{aa} \tag{III.130}$$

e

$$\overline{Z}_a = Z^+_a = \overline{Z}^0_{aa} \ , \tag{III.131}$$

temos:

$$[N_a, Z_t] = 2\,\delta_{at}\,Z_t \ , \tag{III.132}$$

$$[\overline{Z}_r, N_a] = 2\,\delta_{ra}\,\overline{Z}_r \ , \tag{III.133}$$

$$[\overline{Z}_r, Z_t] = \delta_{rt}\left(1 - 2\,\frac{N_r}{[r]}\right) \ , \tag{III.134}$$

$$[\overline{Z}_r, N_a, Z_t] = 2\,\delta_{ra}\,[\overline{Z}_r, Z_t] \tag{III.135}$$

e

$$[\overline{Z}_r, Z_a \overline{Z}_c, Z_t] = \delta_{ra}\,\delta_{ct}\left(1 - 2\,\frac{N_r}{[r]} - 2\,\frac{N_t}{[t]}\right)$$

$$+ 4\,\delta_{ra}\,\delta_{ct}\,\frac{N_r\,N_t}{[rt]}$$

$$- \frac{2}{[r]}\,\delta_{rt}\,(\delta_{ra} + \delta_{ct})\,Z_a\,\overline{Z}_c \ . \tag{III.136}$$

O segundo termo no segundo membro dessa última equação corresponde à soma do segundo e terceiro termos em (III.129), que por sua vez provêm do termo em ABAB em (III.118). Em ordem normal ele fica mais complicado:

$$\frac{4}{[r]}\,\delta_{rt}\,\delta_{ra}\,\delta_{ct}\,\frac{N_r}{[r]} + \frac{8}{[rt]}\,\delta_{ra}\,\delta_{ct}\sum_{\nu}\,[\nu]^{1/2}\left(Z^{\nu}_{rt}\,\overline{Z}^{\nu}_{rt}\right)^0 \ . \tag{III.137}$$

Em todas as equações desta seção, supõe-se que os operadores que aparecem nos primeiros membros não sejam identicamente nulos.

CAPÍTULO IV

EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

IV-1) INTRODUÇÃO

Conforme explicamos no capítulo I, as equações de movimento (I.3), obtidas por Rowe (Row 68) e aplicadas com sucesso a diversos problemas envolvendo excitações partícula-buraco, não se prestam para excitações partícula-partícula, visto que neste caso a condição de aniquilação do estado-pai (a segunda das equações (I.2)) é, em geral, violada.

Como as excitações nas quais estamos interessados são desse tipo, precisamos deduzir novas equações relaxando aquela condição. Isso é feito na seção IV-2 a partir do princípio variacional e, na seção IV-3, é apresentado o método para resolvê-las. As equações são colocadas em forma tensorial na seção IV-4. Finalmente, na seção IV-5, são obtidos explicitamente os diversos termos que nelas aparecem.

IV-2) DERIVAÇÃO VARIACIONAL DE EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

Segundo o princípio variacional, os auto-estados de qualquer hamiltoniana H são os vetores para os quais o valor esperado da energia,

$$E = \frac{\langle\psi| H |\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} , \qquad \text{(IV.1)}$$

visto como um funcional de ψ, é estacionário. Variando-se E em relação a ψ, obtém-se (Mes 66, p.764) a equação

$$\langle\delta\psi| H |\psi\rangle = E \langle\delta\psi|\psi\rangle , \qquad \text{(IV.2)}$$

onde $\delta\psi$ representa uma variação arbitrária do vetor ψ, que deve ser não-nulo, isto é,

$$\langle\psi|\psi\rangle \neq 0 . \qquad \text{(IV.2')}$$

Nesta seção, vamos partir desse princípio para obter as equações de movimento para operadores de excitação genéricos.

Escolhendo um estado particular ϕ, que denominaremos <u>estado-pai</u>, é possível associar a qualquer outro estado ψ um <u>operador de excitação</u> $O^\dagger$ tal que

$$|\psi\rangle = O^\dagger |\phi\rangle . \qquad \text{(IV.3)}$$

Uma variação arbitrária do estado ψ é então dada por

$$|\delta\psi\rangle = \delta O^\dagger |\phi\rangle \qquad \text{(IV.4)}$$

e, introduzindo esses resultados na equação (IV.2), obtemos:

$$\langle\phi|\delta O\, H\, O^\dagger|\phi\rangle = E \langle\phi|\delta O\, O^\dagger|\phi\rangle . \qquad \text{(IV.5)}$$

Esta é a equação que procurávamos. Queremos, porém, colocá-la numa forma semelhante à da equação (I.3), de Rowe, para podermos compará-las. Comecemos por lembrar que

O comutador e o anticomutador de dois operadores quaisquer R e S são definidos por

$$[R, S] = [R, S]_- \tag{IV.6}$$

e

$$\{R, S\} = [R, S]_+ \tag{IV.7}$$

respectivamente, onde

$$[R, S]_\pm = RS \pm SR \ . \tag{IV.8}$$

Analogamente, o duplo-comutador e o duplo-anticomutador simetrizados de três operadores R, S e T quaisquer são definidos (Row+75) por

$$[R, S, T] = [R, S, T]_- \tag{IV.9}$$

e

$$\{R, S, T\} = [R, S, T]_+ \tag{IV.10}$$

respectivamente, onde

$$[R, S, T]_\pm = \tfrac{1}{2}[R, [S, T]]_\pm + \tfrac{1}{2}[[R, S], T]_\pm \ . \tag{IV.11}$$

Valem as seguintes identidades:

$$[R, S]_\pm = \pm [S, R]_\pm \ , \tag{IV.12a}$$

$$[R, S, T]_\pm = \mp [T, S, R]_\pm \tag{IV.12b}$$

e

$$[R, S, T]_\pm = RST \mp TSR - \tfrac{1}{2}\{S, [R, T]_\mp\} \ . \tag{IV.12c}$$

Aplicando esta última ao produto de três operadores no primeiro membro da equação (IV.5), é possível reescrevê-la na forma:

$$\langle\phi|[\delta\mathcal{O}, H, \mathcal{O}^\dagger]_\pm|\phi\rangle \pm \langle\phi|\mathcal{O}^\dagger H \delta\mathcal{O}|\phi\rangle$$

$$+ \frac{1}{2}\langle\phi|\{H, [\delta\mathcal{O}, \mathcal{O}^\dagger]_\mp\}|\phi\rangle = E\langle\phi|\delta\mathcal{O}\,\mathcal{O}^\dagger|\phi\rangle \quad . \qquad \text{(IV.13)}$$

É conveniente introduzir a nova hamiltoniana

$$\mathcal{H} = H - W_o - \mu N \quad , \qquad \text{(IV.14)}$$

onde N é o operador <u>número-de-partículas</u> e os parâmetros W_o (<u>origem da energia</u>) e μ (<u>energia por partícula</u>) terão seus valores escolhidos conforme indicaremos a seguir. O princípio variacional se aplica a qualquer hamiltoniana, portanto a equação (IV.13) permanece válida se substituimos H por $\mathcal{H}$ e E por

$$\mathcal{E} = \frac{\langle\psi|\mathcal{H}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} \quad . \qquad \text{(IV.15)}$$

Até o momento, a escolha do estado-pai era completamente arbitrária; impomos agora que ele satisfaça

$$\mathcal{H}|\phi\rangle = 0 \quad . \qquad \text{(IV.16)}$$

Basta, para isso, que ϕ seja um estado estacionário e que os parâmetros W_o e μ sejam escolhidos de modo que

$$\langle\phi|H|\phi\rangle = W_o\langle\phi|\phi\rangle + \mu\langle\phi|N|\phi\rangle \quad . \qquad \text{(IV.17)}$$

Feito isso, a equação (IV.13) toma a forma mais simples:

$$\langle\phi|[\delta\mathcal{O}, H, \mathcal{O}^\dagger]_\pm|\phi\rangle \pm \langle\phi|\mathcal{O}^\dagger H\,\delta\mathcal{O}|\phi\rangle = \mathcal{E}\langle\phi|\delta\mathcal{O}\,\mathcal{O}^\dagger|\phi\rangle \quad . \qquad \text{(IV.18)}$$

Essa é a equação de movimento que usaremos. Ela é formalmente exata e qualquer solução O^+ gera, através de (IV.3), um auto-estado de H com autovalor E dado por (IV.15). Lembremos, ainda, que essas soluções estão sujeitas à condição (IV.2'),ou seja,

$$\langle\phi|O\,O^\dagger|\phi\rangle \neq 0 \quad . \tag{IV.18'}$$

Antes de prosseguirmos, façamos algumas observações:

Primeiro, não temos em (IV.18) duas equações distintas, mas sim duas formas equivalentes da mesma equação. Qual delas escolher depende do problema em pauta. Assim, para operadores de excitação com número de transferência par ($\alpha=0,\pm2,.....$) os duplos-comutadores são as grandezas mais simples e o sinal inferior em (IV.18) é a escolha acertada. Já para operadores de excitação com número de transferência ímpar ($\alpha=\pm1,\ \pm3,.....$), os duplo-anticomutadores são mais simples e o sinal superior deve ser escolhido.

Segundo, reescrevendo (IV.18) na forma

$$\langle\phi|[\delta O, H, O^\dagger]_\pm|\phi\rangle \pm \langle\phi|O^\dagger H\,\delta O|\phi\rangle =$$

$$E\left(\langle\phi|[\delta O, O^\dagger]_\pm|\phi\rangle \mp \langle\phi|O^\dagger\,\delta O|\phi\rangle\right) \quad , \tag{IV.18"}$$

fica claro que a equação de Rowe, (I.3), se obtém dela desprezando-se os segundos termos tanto no primeiro como no segundo membro. Veremos adiante que o termo de correção $\langle\phi|O^\dagger\delta O|\phi\rangle$, embora não contribua em alguns casos, não pode ser desprezado em geral.

Terceiro e último, o operador de excitação não fica univocamente determinado pela equação (IV.3). Com efeito, ela é satisfeita por qualquer operador da forma

$$\mathcal{O}^{\dagger} = \frac{|\psi\rangle\langle\phi|}{\langle\phi|\phi\rangle} + \sum_{n} |\chi_n\rangle\langle\phi_n^{\perp}| \quad , \qquad \text{(IV.19)}$$

onde χ_n são vetores arbitrários e $\phi_n^{\perp}$ são vetores ortogonais a ϕ. Espera-se, portanto, que a equação de movimento (IV.18) forneça diversos operadores de excitação distintos correspondendo a um mesmo estado ψ. Isto não chega a ser uma dificuldade, no entanto, pois qualquer grandeza de interesse físico será extraída de ψ e não, diretamente, de $\mathcal{O}^{\dagger}$. Aliás, como veremos a seguir, devido ao truncamento do espaço acessível aos operadores de excitação, as equações de movimento acabam por fornecer, muitas vezes, soluções unívocas.

IV-3) MÉTODO PARA A SOLUÇÃO DE EQUAÇÕES DE MOVIMENTO

O primeiro passo para a solução da equação (IV.18) consiste em escolher uma base conveniente de operadores,

$$\{\eta_j^{\dagger} \; ; \; j = 1, 2, \ldots\} \quad , \qquad \text{(IV.20)}$$

na qual os operadores de excitação possam ser expandidos, isto é, escritos na forma

$$\mathcal{O}^{\dagger} = \sum_{j} X_j \, \eta_j^{\dagger} \quad . \qquad \text{(IV.21)}$$

Resolver a referida equação equivale, agora, a determinar os coeficientes X_j acima.

Uma variação arbitrária do operador de excitação, ou melhor, de seu conjugado hermitiano, escreve-se

$$\delta\mathcal{O} = \sum_{j'} \delta X_{j'}^{*} \, \eta_{j'} \quad . \qquad \text{(IV.22)}$$

Esses dois resultados, introduzidos na equação (IV.18), dão lugar a

$$\sum_{j'j} \delta X^{*}_{j'} \mathcal{H}_{j'j} X_j = E \sum_{j'j} \delta X^{*}_{j'} \mathcal{M}_{j'j} X_j \quad , \qquad \text{(IV.23)}$$

tendo sido definidas as seguintes matrizes hermitianas: a <u>matriz de energia</u>

$$\mathcal{H}_{j'j} = \mathcal{H}^{(\pm)}_{j'j} \pm h_{j'j} \quad , \qquad \text{(IV.24)}$$

a <u>matriz principal</u>

$$\mathcal{H}^{(\pm)}_{j'j} = \langle \phi | [\eta_{j'}, H, \eta^{\dagger}_{j}]_{\pm} | \phi \rangle \quad , \qquad \text{(IV.25)}$$

a <u>matriz de correção</u>

$$h_{j'j} = \langle \phi | \eta^{\dagger}_{j} H \eta_{j'} | \phi \rangle \qquad \text{(IV.26)}$$

e a <u>matriz-métrica</u>

$$\mathcal{M}_{j'j} = \langle \phi | \eta_{j'} \eta^{\dagger}_{j} | \phi \rangle \quad . \qquad \text{(IV.27)}$$

Usando a propriedade (IV.16) e a identidade (IV.12c), podemos ainda escrever a matriz de energia na forma

$$\mathcal{H}_{j'j} = \langle \phi | \eta_{j'} H \eta^{\dagger}_{j} | \phi \rangle \quad . \qquad \text{(IV.28)}$$

Voltando à equação (IV.23),

$$\sum_{j'} \delta X^{*}_{j'} \left(\sum_{j} \mathcal{H}_{j'j} X_j - E \sum_{j} \mathcal{M}_{j'j} X_j \right) = 0 \quad , \qquad \text{(IV.29)}$$

e notando que os $\delta X^{*}_{j'}$ são totalmente arbitrários, concluímos que:

$$\sum_{j} \mathcal{H}_{j'j} X_j = E \sum_{j} \mathcal{M}_{j'j} X_j \qquad \text{(IV.30)}$$

para j' = 1,2,... Quanto à condição (IV.18'), ela toma a forma

$$\sum_{j'j} X_{j'}^{*} \mathcal{M}_{j'j} X_j \neq 0 \quad . \tag{IV.30'}$$

Reduzimos assim a solução da equação de movimento (IV.18,18') à solução do sistema linear homogêneo (IV.30) com a condição subsidiária (IV.30'). Nele a matriz $\mathcal{H}_{j'j}$ é hermitiana, $\mathcal{M}_{j'j}$ é positiva e $\mathcal{H}_{j'j}$ é compatível com $\mathcal{M}_{j'j}$. Trata-se, portanto, de um problema de autovalores relativos, estudado detalhadamente no apêndice A.

Enunciemos os principais resultados:

1º) O sistema de equações (IV.30) tem solução satisfazendo (IV.30') somente para determinados valores do parâmetro E, todos reais, chamados autovalores de $\mathcal{H}_{j'j}$ em relação a $\mathcal{M}_{j'j}$. Denotemo-os por E_i com i = 1,2,..., podendo haver repetições (autovalores degenerados).

2º) Correspondendo a cada E_i existe uma solução de (IV.30), que chamaremos de autovetor de $\mathcal{H}_{j'j}$ em relação a $\mathcal{M}_{j'j}$, cujas componentes $X_j^{(i)}$ com j = 1,2,... podem ser escolhidas de modo a satisfazerem as relações de ortonormalidade

$$\sum_{j'j} X_{j'}^{(i')*} \mathcal{M}_{j'j} X_j^{(i)} = \delta_{i'i} \tag{IV.31}$$

para i',i = 1,2,...

3º) A solução correspondente a E_i, normalizada conforme (IV.31), contém ainda uma fase global arbitrária, como é usual em problemas desse tipo. Além disso, porém, dada uma solução normalizada $X_j^{(i)}$ é possível obter outra solução igualmente normalizada e correspondendo ao mesmo autovalor na forma

$$X'^{(i)}_j = X_j^{(i)} + Y_j^{(i)} \tag{IV.32}$$

com j = 1,2,..., onde os $Y_j^{(i)}$ são números complexos satisfazendo

$$\sum_j \mathcal{M}_{j'j}\, Y_j^{(i)} = 0 \qquad \text{(IV.33)}$$

para j' = 1,2,... Pode ocorrer, entretanto, que a matriz $\mathcal{M}_{j'j}$ seja positiva-definida (apêndice A). Neste caso (IV.33) só é satisfeita com os $Y_j^{(i)}$ todos nulos e desaparece a arbitrariedade acima.

4º) Apesar das componentes $X_j^{(i)}$ conterem, em geral, a arbitrariedade (IV.32), é possível construir as amplitudes de excitação

$$s_{j'}^{(i)} = \sum_j \mathcal{M}_{j'j}\, X_j^{(i)} \qquad \text{(IV.34)}$$

que são unívocas (a menos de uma fase independente de j').

Passemos às conseqüências desses resultados:

Encontradas as soluções normalizadas $X_j^{(i)}$ do sistema (IV.30,30'), construímos os operadores de excitação correspondentes

$$\mathcal{O}_i^\dagger = \sum_j X_j^{(i)}\, \eta_j^\dagger \quad , \qquad \text{(IV.35)}$$

conforme a equação (IV.21). Com eles é possível obter, através de (IV.3), os auto-estados

$$|\psi_i\rangle = \mathcal{O}_i^\dagger\, |\phi\rangle \qquad \text{(IV.36)}$$

da hamiltoniana H definida em (IV.14).

Como decorre das relações (IV.31), esses estados são ortonormais, isto é,

$$\langle \psi_{i'} | \psi_i \rangle = \delta_{i'i} \qquad \text{(IV.37)}$$

com i',i = 1,2,... Portanto

$$\langle \phi | \mathcal{O}_{i'} \mathcal{O}_i^{\dagger} | \phi \rangle = \delta_{i'i} \quad . \tag{IV.38}$$

O significado físico do autovalor E_i é dado pela equação (IV.15), segundo a qual

$$E_i = \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle \tag{IV.39}$$

ou, usando a equação (IV.14),

$$E_i = \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - W_0 - \mu \langle \psi_i | N | \psi_i \rangle \quad . \tag{IV.40}$$

Convém lembrar que H é a hamiltoniana original, enquanto H é a hamiltoniana modificada de modo a satisfazer a equação (IV.16). Devido à equação (IV.17), podemos ainda escrever

$$E_i = \left(\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) - \mu \left(\langle \psi_i | N | \psi_i \rangle - \frac{\langle \phi | N | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) \quad . \tag{IV.41}$$

Vemos, assim, que E_i representa o acréscimo introduzido pela excitação $\mathcal{O}_i^{\dagger}$ na energia do sistema físico representado inicialmente pelo estado-pai, subtraída uma parcela ligada à variação do número de partículas.

Em lugar dos operadores dados por (IV.35), poderíamos igualmente escolher

$$\mathcal{O}'^{\dagger}_i = \sum_j X'^{(i)}_j \eta_j^{\dagger} \quad . \tag{IV.42}$$

com as novas componentes dadas por (IV.32). Isso está ligado à não-unicidade dos operadores de excitação, a que nos referimos no final da seção anterior. Uma conseqüência é que as componentes $X_j^{(i)}$ não podem ter um significado físico direto. No entanto, conforme já mencionamos, as amplitudes de excitação $s_j^{(i)}$, dadas pela equação (IV.34), independem da escolha des -

sas componentes, sendo de fato unívocas a menos de uma fase global. Não deve portanto surpreender, que estas amplitudes tenham, elas sim, um significado físico importante, como teremos oportunidade de ver mais adiante.

Para finalizar lembremos que se $\mathcal{H}_{j'j}$ e $\mathcal{M}_{j'j}$ forem matrizes reais, as soluções $X_j^{(i)}$ podem também ser escolhidas reais, já que (IV.30) é um sistema linear homogêneo. Este será o caso em todas as aplicações que faremos neste trabalho.

IV-4) EQUAÇÕES DE MOVIMENTO TENSORIAIS

Pode acontecer que a hamiltoniana H seja invariante pelas transformações de algum grupo, que suporemos sempre ser ou SU(2) ou um produto direto de grupos SU(2), o que nos permite usar os resultados do capítulo II. Nesse caso o espectro de H é degenerado, correspondendo a cada autovalor um subespaço invariante irredutível. Em outras palavras, os auto-estados são tensores e o problema de autovalores escreve-se

$$H\,\psi^{\Lambda}_{x\hat{\Lambda}} = E_{x\Lambda}\,\psi^{\Lambda}_{x\hat{\Lambda}} \quad , \qquad \text{(IV.43)}$$

na notação daquele capítulo e com x representando os rótulos adicionais necessários à completa caracterização dos vetores. Embora não o tenhamos indicado explicitamente para não sobrecarregar a escrita, H, sendo invariante, é um tensor de ordem zero (seção II-7).

Decorre do parágrafo anterior que podemos aplicar o princípio variacional separadamente a cada subespaço varrido apenas pelos vetores com índices tensoriais $\Lambda\hat{\Lambda}$ fixos, substituindo assim as equações (IV.1) e (IV.2,2') por

$$E_{\wedge} = \frac{\langle \psi^{\wedge}_{\hat{\wedge}} | H | \psi^{\hat{\wedge}}_{\hat{\wedge}} \rangle}{\langle \psi^{\wedge}_{\hat{\wedge}} | \psi^{\hat{\wedge}}_{\hat{\wedge}} \rangle} \quad , \tag{IV.44}$$

$$\langle \delta\psi^{\wedge}_{\hat{\wedge}} | H | \psi^{\hat{\wedge}}_{\hat{\wedge}} \rangle = E \langle \delta\psi^{\wedge}_{\hat{\wedge}} | \psi^{\hat{\wedge}}_{\hat{\wedge}} \rangle \tag{IV.45}$$

e

$$\langle \psi^{\wedge}_{\hat{\wedge}} | \psi^{\hat{\wedge}}_{\hat{\wedge}} \rangle \neq 0 \tag{IV.45'}$$

respectivamente. Estudaremos aqui as conseqüências disso para as equações de movimento, considerando inicialmente o caso mais simples em que o estado-pai é um tensor de ordem zero e passando depois ao mais geral. Em ambos os casos as equações continuam análogas às das seções IV-2 e IV-3 se bem que com expressões mais complicadas para as matrizes de energia e métrica.

IV-4.1) ESTADO-PAI COM ORDEM TENSORIAL NULA

Neste caso, sendo $|\phi\rangle$ o estado-pai, o operador de excitação $\mathcal{O}^{\dagger}_{\wedge\hat{\wedge}}$ satisfaz

$$|\psi^{\wedge}_{\hat{\wedge}}\rangle = \mathcal{O}^{\dagger}_{\wedge\hat{\wedge}} |\phi\rangle \quad , \tag{IV.46}$$

o que mostra ser o mesmo um tensor:

$$\mathcal{O}^{\dagger}_{\wedge\hat{\wedge}} = Q_{\wedge\hat{\wedge}} \quad . \tag{IV.47}$$

A equação de movimento (IV.18) escreve-se

$$\langle\phi|[\delta\mathcal{O}_{\wedge\hat{\wedge}}, H, \mathcal{O}^{\dagger}_{\wedge\hat{\wedge}}]_{\pm}|\phi\rangle \pm \langle\phi|\mathcal{O}^{\dagger}_{\wedge\hat{\wedge}} H \delta\mathcal{O}_{\wedge\hat{\wedge}}|\phi\rangle =$$

$$E_{\wedge}\langle\phi|\delta\mathcal{O}_{\wedge\hat{\wedge}}\mathcal{O}^{\dagger}_{\wedge\hat{\wedge}}|\phi\rangle \quad . \tag{IV.48}$$

Cada um dos elementos de matriz acima é uma forma invariante do tipo (II.107) e pelo resultado (II.109) temos

$$\langle\phi|\left[\delta\mathcal{O}_{\Lambda\hat{\Lambda}}, H, \mathcal{O}^{+}_{\Lambda\hat{\Lambda}}\right]_{\pm}|\phi\rangle = [\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|\left[\delta\bar{Q}^{\Lambda}, H, Q^{\Lambda}\right]^{0}_{\pm}|\phi\rangle \quad , \tag{IV.49}$$

$$\langle\phi|\mathcal{O}^{+}_{\Lambda\hat{\Lambda}} H\,\delta\mathcal{O}_{\Lambda\hat{\Lambda}}|\phi\rangle = (-)^{2\Lambda}[\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|(Q^{\Lambda} H\,\delta\bar{Q}^{\Lambda})^{0}|\phi\rangle \tag{IV.50}$$

e

$$\langle\phi|\,\delta\mathcal{O}_{\Lambda\hat{\Lambda}}\,\mathcal{O}^{+}_{\Lambda\hat{\Lambda}}|\phi\rangle = [\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|(\delta\bar{Q}^{\Lambda}\,Q^{\Lambda})^{0}|\phi\rangle \quad , \tag{IV.51}$$

o que nos permite reescrever aquela equação na forma acoplada:

$$[\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|\left[\delta\bar{Q}^{\Lambda}, H, Q^{\Lambda}\right]^{0}_{\pm}|\phi\rangle \pm (-)^{2\Lambda}[\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|(Q^{\Lambda} H\,\delta\bar{Q}^{\Lambda})^{0}|\phi\rangle =$$

$$E_{\Lambda}\,[\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|(\delta\bar{Q}^{\Lambda}\,Q^{\Lambda})^{0}|\phi\rangle \quad , \tag{IV.52}$$

enquanto a condição (IV.18') passa a

$$[\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|\,(\bar{Q}^{\Lambda}\,Q^{\Lambda})^{0}|\phi\rangle \neq 0 \quad . \tag{IV.52'}$$

O procedimento para resolvê-la é o mesmo da seção IV-3, só que no presente caso podemos escolher uma base de operadores formada apenas por tensores de ordem Λ e a expansão (IV.21) fica sendo

$$Q^{\Lambda} = \sum_{j} X^{(\Lambda)}_{j}\,\xi^{\Lambda}_{j} \quad , \tag{IV.53}$$

o que leva, analogamente a (IV.30,30'), à seguinte equação de autovalores relativos:

$$\sum_{j} \mathcal{H}^{(\Lambda)}_{j'j}\,X^{(\Lambda)}_{j} = E_{\Lambda}\sum_{j}\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'j}\,X^{(\Lambda)}_{j} \quad , \tag{IV.54}$$

com a condição subsidiária

$$\sum_{j'j} X^{(\Lambda)*}_{j'}\,\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'j}\,X^{(\Lambda)}_{j} \neq 0 \quad . \tag{IV.54'}$$

As novas matrizes são: a matriz de energia

$$\mathcal{H}^{(\Lambda)}_{j'j} = \mathcal{H}^{(\Lambda\pm)}_{j'j} \pm h^{(\Lambda)}_{j'j} \quad , \tag{IV.55}$$

a matriz principal

$$\mathcal{H}^{(\Lambda\pm)}_{j'j} = [\Lambda]^{-1/2} \cdot \langle\phi|\left[\bar{\xi}^{\wedge}_{j'}, H, \xi^{\wedge}_{j}\right]^{0}_{\pm}|\phi\rangle \, , \tag{IV.56}$$

a matriz de correção

$$h^{(\Lambda)}_{j'j} = (-)^{2\Lambda}\,[\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|\left(\bar{\xi}^{\wedge}_{j'} H \xi^{\wedge}_{j}\right)^{0}|\phi\rangle \tag{IV.57}$$

e a matriz-métrica

$$\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'j} = [\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|\left(\bar{\xi}^{\wedge}_{j'}\, \xi^{\wedge}_{j}\right)^{0}|\phi\rangle \quad . \tag{IV.58}$$

A matriz de energia escreve-se também na forma

$$\mathcal{H}^{(\Lambda)}_{j'j} = [\Lambda]^{-1/2}\langle\phi|\left(\bar{\xi}^{\wedge}_{j'} H\, \xi^{\wedge}_{j}\right)^{0}|\phi\rangle \quad . \tag{IV.59}$$

Como na seção IV-3, as soluções são escolhidas com a normalização

$$\sum_{j'j} X^{(\Lambda i')*}_{j'} \mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'j} X^{(\Lambda i)}_{j} = \delta_{i'i} \quad . \tag{IV.60}$$

Com elas se constróem os operadores de excitação

$$Q^{\wedge}_{i} = \sum_{j} X^{(\Lambda i)}_{j}\, \xi^{\wedge}_{j} \tag{IV.61}$$

e por meio deles os auto-estados de H,

$$|\psi_i{}^{\wedge}\rangle = Q^{\wedge}_{i}\,|\phi\rangle \quad , \tag{IV.62}$$

que, devido a (IV.60), são ortonormais(*):

$$\langle\psi_{i'}{}^{\wedge}_{\hat{\Lambda}}\,|\,\psi_{i}{}^{\wedge}_{\hat{\Lambda}}\rangle = \delta_{i'i} \quad . \tag{IV.63}$$

(*) Essa foi a razão pela qual mantivemos os fatores $[\Lambda]^{-1/2}$ nas equações (IV.52) e (IV.56-59). Se os tivéssemos cancelado, a normalização, em vez de (IV.63), teria sido: $\langle\psi^{\wedge}_{i'}\,\|\,\psi_i{}^{\wedge}\rangle = \delta_{i'i}$.

Resolvida a equação (IV.54) para diversos valores de Λ, essa propriedade generaliza-se para

$$\langle \psi^{\Lambda'}_{i'\hat{\Lambda}'} | \psi^{\Lambda}_{i\hat{\Lambda}} \rangle = \delta_{i'i}\, \delta_{\Lambda'\Lambda}\, \delta_{\hat{\Lambda}'\hat{\Lambda}} \ , \qquad \text{(IV.64)}$$

devido simplesmente ao caráter tensorial desses estados (ver equação (II.110). A possível arbitrariedade aditiva das componentes $X_j^{(\Lambda i)}$ desaparece nas amplitudes de excitação

$$s_{j'}^{(\Lambda i)} = \sum_j \mathcal{M}_{j'j}^{(\Lambda)}\, X_{j'}^{(\Lambda i)} \ . \qquad \text{(IV.65)}$$

IV-4.2) ESTADO-PAI COM ORDEM TENSORIAL NÃO-NULA

Agora o operador de excitação não é mais necessariamente um tensor (Row+75), mas pode ser sempre decomposto numa soma de tensores com as diferentes ordens tensoriais permitidas pela regra triangular, isto é,

$$Q_\Lambda = \sum_{\lambda=|\Lambda-\Delta|}^{\Lambda+\Delta} q^\lambda \ . \qquad \text{(IV.66)}$$

Tem-se então, sendo ϕ^Δ o estado-pai,

$$\psi^\Lambda = \sum_{\lambda=|\Lambda-\Delta|}^{\Lambda+\Delta} (q^\lambda \phi^\Delta)^\Lambda \ . \qquad \text{(IV.67)}$$

A equação de movimento (IV.18) escreve-se, neste caso,

$$\sum_{\substack{\lambda\hat{\lambda}\hat{\Delta} \\ \lambda'\hat{\lambda}'\hat{\Delta}'}} C^{\lambda'\Delta\Lambda}_{\hat{\lambda}'\hat{\Delta}'\hat{\Lambda}} C^{\lambda\Delta\Lambda}_{\hat{\lambda}\hat{\Delta}\hat{\Lambda}} \Big\{ \langle \phi^\Delta_{\hat{\Delta}'} | \big[(\delta q^{\lambda'}_{\hat{\lambda}'})^\dagger, H, q^\lambda_{\hat{\lambda}} \big]_\pm | \phi^\Delta_{\hat{\Delta}} \rangle$$

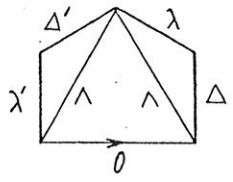
$$\pm \langle \phi^\Delta_{\hat{\Delta}'} | q^\lambda_{\hat{\lambda}} H (\delta q^{\lambda'}_{\hat{\lambda}'})^\dagger | \phi^\Delta_{\hat{\Delta}} \rangle \qquad \text{(IV.68)}$$

$$- E_\Lambda \langle \phi^\Delta_{\hat{\Delta}'} | (\delta q^{\lambda'}_{\hat{\lambda}'})^\dagger q^\lambda_{\hat{\lambda}} | \phi^\Delta_{\hat{\Delta}} \rangle \Big\} = 0 \ .$$

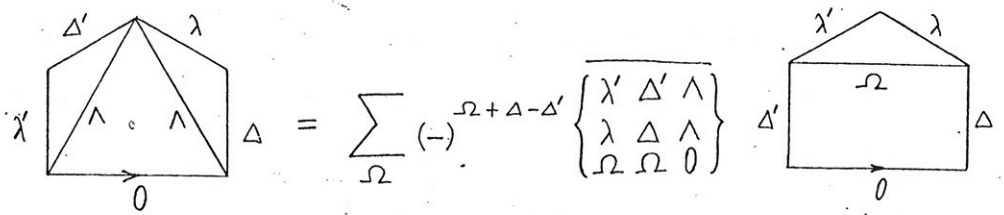
Nela aparecem formas invariantes do tipo (II.107) e, devido ao resultado (II.109), ela é equivalente a

$$\sum_{\lambda\lambda'} [\Lambda]^{-1/2} \Big\{ \big(\bar{\Phi}^{\Delta'} [\delta\bar{q}^{\lambda'}, H, q^{\lambda}]_{\pm} \phi^{\Delta}\big)^{0} \pm \big(\bar{\Phi}^{\Delta'} q^{\lambda} H \, \delta\bar{q}^{\lambda'} \phi^{\Delta}\big)^{0} - E_{\Lambda} \big(\bar{\Phi}^{\Delta'} \delta\bar{q}^{\lambda'} q^{\lambda} \phi^{\Delta}\big)^{0} \Big\} = 0 \quad ,$$

onde $\Delta' = \Delta$ e todos os acoplamentos tensoriais são feitos segundo o esquema



Introduzindo-se acima a fórmula de reacoplamento



, (IV.69)

resulta a equação de movimento em forma tensorial acoplada:

$$\sum_{\lambda\lambda'\Omega} \frac{(-)^{\Omega}}{[\Lambda]^{1/2}} \begin{Bmatrix} \lambda' & \Delta & \Lambda \\ \lambda & \Delta & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \end{Bmatrix} \Big\{ \big(\bar{\Phi}^{\Delta} [\delta\bar{q}^{\lambda'}, H, q^{\lambda}]^{\Omega}_{\pm} \phi^{\Delta}\big)^{0} \pm (-)^{\lambda'+\lambda-\Omega} \big(\bar{\Phi}^{\Delta} (q^{\lambda} H \, \delta\bar{q}^{\lambda'})^{\Omega} \phi^{\Delta}\big)^{0} - E_{\Lambda} \big(\bar{\Phi}^{\Delta} (\delta\bar{q}^{\lambda'} q^{\lambda})^{\Omega} \phi^{\Delta}\big)^{0} \Big\} = 0 \quad . \tag{IV.70}$$

Para resolvê-la, como das vezes anteriores, expandimos os operadores de excitação escrevendo

$$q^{\lambda} = \sum_{j} X^{(\Lambda)}_{j\lambda} \, \xi^{\lambda}_{j} \quad , \tag{IV.71}$$

e ela toma a forma de uma equação de autovalores relativos,

$$\sum_{j\lambda} \mathcal{H}^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} X^{(\Lambda)}_{j\lambda} = E_\Lambda \sum_{j\lambda} \mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} X^{(\Lambda)}_{j\lambda} \quad , \tag{IV.72}$$

perfeitamente análoga e com as mesmas propriedades que (IV.30) e (IV.54), envolvendo as seguintes matrizes: a matriz de energia

$$\mathcal{H}^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} = \mathcal{H}^{(\Lambda\pm)}_{j'\lambda',j\lambda} \pm h^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} \quad , \tag{IV.73}$$

a matriz principal

$$\mathcal{H}^{(\Lambda\pm)}_{j'\lambda',j\lambda} = \sum_{\Omega} \frac{(-)^{\Omega}}{[\Lambda]^{1/2}} \begin{Bmatrix} \lambda' & \Delta & \Lambda \\ \lambda & \Delta & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \end{Bmatrix} \left(\bar{\Phi}^{\Delta} \left[\bar{\xi}^{\lambda'}_{j'}, H, \xi^{\lambda}_{j} \right]^{\Omega}_{\pm} \phi^{\Delta} \right)^{0} \quad , \tag{IV.74}$$

a matriz de correção

$$h^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} = \sum_{\Omega} \frac{(-)^{\Omega}}{[\Lambda]^{1/2}} \begin{Bmatrix} \lambda' & \Delta & \Lambda \\ \lambda & \Delta & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \end{Bmatrix} \left(\bar{\Phi}^{\Delta} \left(\xi^{\lambda}_{j} H \bar{\xi}^{\lambda'}_{j'} \right)^{\Omega} \phi^{\Delta} \right)^{0} \tag{IV.75}$$

e à matriz-métrica

$$\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} = \sum_{\Omega} \frac{(-)^{\Omega}}{[\Lambda]^{1/2}} \begin{Bmatrix} \lambda' & \Delta & \Lambda \\ \lambda & \Delta & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \end{Bmatrix} \left(\bar{\Phi}^{\Delta} \left(\bar{\xi}^{\lambda'}_{j'} \xi^{\lambda}_{j} \right)^{\Omega} \phi^{\Delta} \right)^{0} \quad . \tag{IV.76}$$

Esta última escreve-se também

$$\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{j'\lambda',j\lambda} = [\Lambda]^{-1/2} \left(\left(\overline{\xi^{\lambda'}_{j'} \phi^{\Delta}} \right)^{\wedge} \left(\xi^{\lambda}_{j} \phi^{\Delta} \right)^{\wedge} \right)^{0} = \left\langle \left(\xi^{\lambda'}_{j'} \phi^{\Delta} \right)^{\wedge}_{\hat{\Lambda}} \middle| \left(\xi^{\lambda}_{j} \phi^{\Delta} \right)^{\wedge}_{\hat{\Lambda}} \right\rangle \quad , \tag{IV.77}$$

continuando a ser, portanto, uma matriz positiva.

IV-5) EQUAÇÃO DE MOVIMENTO PARA EXCITAÇÕES PARTÍCULA-PARTÍCULA

Por simplicidade, nos limitaremos à transferência de dois nêutrons ou dois prótons em núcleos par-par (portanto com $J^{\pi} = 0^{+}$) ou então de dois núcleons quaisquer em núcleos par-par sem excesso de nêutrons (portanto com $J^{\pi} = 0^{+}$ e $T = 0$). A esco

lha óbvia para o estado-pai ϕ é o estado fundamental do núcleo alvo, um tensor de ordem nula, valendo, portanto, as equações da subseção IV-4.1. O formalismo pode ser generalizado para os demais casos procedendo-se como em IV-4.2.

Sendo H nas equações (III.31-33) a hamiltoniana nuclear, a hamiltoniana modificada segundo (IV.14, 16) será

$$H = K + V \quad , \tag{IV.78}$$

onde

$$K = \sum_a \varepsilon_a N_a \tag{IV.79}$$

é a nova hamiltoniana de partículas independentes, com

$$\varepsilon_a = e_a - \mu \tag{IV.80}$$

e

$$\mu = \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | N | \phi \rangle} \quad , \tag{IV.81}$$

enquanto

$$V = V = \sum_{\substack{abcd:\Omega \\ (a\leq b,\, c\leq d)}} [\Omega]^{1/2} W^{(\Omega)}_{abcd} \left(Z^{\Omega}_{ab} \bar{Z}^{\Omega}_{cd} \right)^0 \tag{IV.82}$$

é a interação efetiva.

Se o núcleo-alvo estiver próximo a camadas fechadas, uma escolha apropriada para os operadores de base (seção IV-4.1) são os operadores de estado $\hat{Z}_{tu}$. A expansão (IV.53) dos operadores de excitação escreve-se, então,

$$Q^{\wedge} = \sum_{\substack{tu \\ (t\leq u)}} X^{(\wedge)}_{tu} \hat{Z}_{tu} \tag{IV.83}$$

e a equação de autovalores relativos (IV.54) toma a forma

$$\sum_{\substack{tu \\ (t\leq u)}} \mathcal{H}^{(\Lambda)}_{rs\,tu}\, X^{(\Lambda)}_{tu} = E_\Lambda \sum_{\substack{tu \\ (t\leq u)}} \mathcal{M}^{(\Lambda)}_{rs\,tu}\, X^{(\Lambda)}_{tu} \quad , \tag{IV.84}$$

onde

$$\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = [\Lambda]^{-1/2} \langle \Phi | (\bar{Z}^{\Lambda}_{rs}\, Z^{\Lambda}_{tu})^0 | \Phi \rangle \tag{IV.85}$$

é a matriz-métrica e

$$\mathcal{H}^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = [\Lambda]^{-1/2} \langle \Phi | (\bar{Z}^{\Lambda}_{rs}\, H\, Z^{\Lambda}_{tu})^0 | \Phi \rangle \tag{IV.86}$$

é a matriz de energia. Pelo que foi dito no final da seção IV-2, devemos escolher o sinal inferior em (IV.18) e a decomposição (IV.55-57) da matriz de energia fica sendo

$$\mathcal{H}^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = \mathcal{H}^{(\Lambda-)}_{rs\,tu} - h^{(\Lambda)}_{rs\,tu} \quad , \tag{IV.87}$$

em termos da matriz principal

$$\mathcal{H}^{(\Lambda-)}_{rs\,tu} = [\Lambda]^{-1/2} \langle \Phi | [\bar{Z}^{\Lambda}_{rs}, H, Z^{\Lambda}_{tu}]^0 | \Phi \rangle \tag{IV.88}$$

e da matriz de correção

$$h^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = [\Lambda]^{-1/2} \langle \Phi | (Z^{\Lambda}_{tu}\, H\, \bar{Z}^{\Lambda}_{rs})^0 | \Phi \rangle \quad , \tag{IV.89}$$

onde levamos em conta que Λ é, necessariamente, um número inteiro. É fácil verificar nas equações (IV.85-89) que, efetivamente, todas essas matrizes são hermitianas(*) e a matriz de ener

(*) Com uma convenção de fases conveniente , reais e simétri - cas.

gia é compatível com a matriz-métrica, que é positiva.

Como vimos em IV-4.1, escolhendo-se as soluções de (IV.84) com a normalização

$$\sum_{\substack{rs\,tu \\ (r\le s,\, t\le u)}} X^{(\lambda i')*}_{rs}\, \mathcal{M}^{(\lambda)}_{rs\,tu}\, X^{(\lambda i)}_{tu} = \delta_{i'i} \quad , \tag{IV.90}$$

os operadores de excitação correspondentes,

$$Q^{\hat{\lambda}}_{i} = \sum_{\substack{tu \\ (t\le u)}} X^{(\lambda i)}_{tu}\, Z^{\hat{\lambda}}_{tu} \quad , \tag{IV.91}$$

criam estados ortonormais, isto é,

$$|\psi_i{}^{\hat{\lambda}}\rangle = Q_i^{\hat{\lambda}}\,|\phi\rangle \tag{IV.92}$$

e

$$\langle \psi_{i'\hat{\lambda}'}{}^{\lambda'} \,|\, \psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}\rangle = \delta_{i'i}\,\delta_{\lambda'\lambda}\,\delta_{\hat{\lambda}'\hat{\lambda}} \quad . \tag{IV.93}$$

Os autovalores relacionam-se com a energia conforme a equação (IV.41):

$$E_{\lambda i} = \left(\langle \psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}|H|\psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}\rangle - \frac{\langle\phi|H|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\right) - \mu\left(\langle\psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}|N|\psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}\rangle - \frac{\langle\phi|N|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle}\right)$$

$$= \langle \psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}|H|\psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}\rangle - \mu\langle\psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}|N|\psi_{i\hat{\lambda}}{}^{\lambda}\rangle \quad . \tag{IV.94}$$

Consideremos agora as amplitudes espectroscópicas para reações de transferência de dois núcleons. Para uma reação de "stripping" partimos da equação (B . 4) e, notando que o alvo é representado pelo estado-pai e escrevendo o estado final em termos do operador de excitação, obtemos

$$S_{+}(rs\,\lambda\,i) = [\lambda]^{-1/2}\langle\phi|\left(\bar{Z}^{\lambda}_{rs}\, Q^{\hat{\lambda}}_{i}\right)^{0}|\phi\rangle \quad , \tag{IV.95}$$

ou seja, em vista de (IV.83) e (IV.85),

$$S_{+}(rs\wedge i) = \mathcal{S}_{rs}^{(\wedge i)} \quad , \tag{IV.96}$$

onde

$$\mathcal{S}_{rs}^{(\wedge i)} = \sum_{\substack{tu \\ (t\leq u)}} \mathcal{M}_{rs\,tu}^{(\wedge)} \, X_{tu}^{(\wedge)} \tag{IV.97}$$

é a amplitude de excitação (IV.65). Para reações de "pick-up" partimos de (B.6) e, procedendo analogamente, obtemos

$$S_{-}(rs\wedge i) = -\langle\phi|\left(\bar{Q}_{i}^{\wedge}\, Z_{rs}^{\wedge}(buracos)\right)^{0}|\phi\rangle \, , \tag{IV.98}$$

onde $Z_{rs}^{\wedge}$ é, agora, um operador de estado para buracos. Temos também:

$$S_{-}(rs\wedge i) = -[\wedge]^{1/2}\, \mathcal{S}_{rs}^{(\wedge i)\,*} \, . \tag{IV.99}$$

Portanto, como havíamos previsto no final da seção IV-3, as amplitudes de excitação têm um significado físico importante. Elas são essencialmente, as amplitudes espectroscópicas das reações específicas para os correspondentes operadores de excitação.

Damos a seguir expressões para $\mathcal{M}_{rs\,tu}^{(\wedge)}$ e $\mathcal{H}_{rs\,tu}^{(\wedge -)}$ envolvendo apenas as densidades de uma e duas partículas no estado pai e para $h_{rs\,tu}^{(\wedge)}$ envolvendo as densidades de três e quatro partículas. As expressões são válidas para r $\leq$ s e t $\leq$ u, os demais casos podendo ser obtidos desses por simetria.

No que segue em todo o restante deste trabalho, suporemos que não há mais de um orbital com o mesmo valor do momento angular total, o que é verdade em cálculos de estrutura nuclear envolvendo uma única camada e permite, como na seção III-7, simplificar as equações escrevendo

$$\delta^{ab} = \delta_{ab} \quad , \tag{IV.100}$$

onde δ^{ab} é o delta de Kronecker envolvendo apenas os índices de ordem tensorial contidos em a e b.

IV-5.1) MATRIZ-MÉTRICA

Consideremos a identidade

$$\left(\bar{Z}^{\wedge}_{rs}\, Z^{\wedge}_{tu}\right)^{0} = \left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs}, Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0} + \left(Z^{\wedge}_{tu}\, \bar{Z}^{\wedge}_{rs}\right)^{0} . \tag{IV.101}$$

O comutador está calculado em (III.127) e, lembrando as definições (III.27) e (III.28) para as densidades de uma e duas partículas ρ e Γ, reescrevemos a identidade inicial na forma(*)

$$[\wedge]^{-1/2}\left(\bar{Z}^{\wedge}_{rs}\, Z^{\wedge}_{tu}\right)^{0} = \delta_{rt}\,\delta_{su}(1-\rho_r-\rho_s) + \Gamma^{(\wedge)}_{rs\,tu} \quad . \tag{IV.102}$$

Introduzindo-a em (IV.85), obtemos a seguinte expressão para a matriz-métrica(*):

$$\mathcal{M}^{(\wedge)}_{rs\,tu} = \delta_{rt}\,\delta_{su}\langle\phi|(1-\rho_r-\rho_s)|\phi\rangle + \langle\phi|\Gamma^{(\wedge)}_{rs\,tu}|\phi\rangle \quad . \tag{IV.103}$$

IV-5.2) MATRIZ PRINCIPAL

Convém calcular separadamente as contribuições da hamiltoniana de partículas independentes e da interação efetiva.

A contribuição de K é

$$\mathcal{K}^{(\wedge-)}_{rs\,tu} = \sum_a \varepsilon_a \frac{\langle\phi|\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs}, N_a, Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0}|\phi\rangle}{[\wedge]^{1/2}} \quad , \tag{IV.104}$$

(*) Para $r \leq s$ e $t \leq u$

onde usamos (IV.79) e (IV.88). De acordo com (III.128) e (III.127) (*)

$$\mathcal{K}^{(\wedge-)}_{rs\,tu} = \delta_{rt}\,\delta_{su}\,(\varepsilon_r+\varepsilon_s)\langle\phi|\,(1-\rho_r-\rho_s)\,|\phi\rangle \quad . \tag{IV.105}$$

Passando agora à contribuição de V, partimos das equações (IV.82) e (IV.88), obtendo para a mesma

$$\mathcal{V}^{(\wedge-)}_{rs\,tu} = \sum_{\substack{abcd:\Omega \\ (a\leq b,\ c\leq d)}} W^{(\Omega)}_{abcd}\left[\frac{\Omega}{\wedge}\right]^{1/2}\langle\phi|\left[\bar{Z}^{\wedge}_{rs},\left(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd}\right)^{0},Z^{\wedge}_{tu}\right]^{0}|\phi\rangle \quad . \tag{IV.106}$$

O duplo-comutador está calculado em (III.129) e, introduzido esse resultado em (IV.106), resulta depois de um cálculo direto se bem que tedioso (**)

(*) Para $r\leq s$ e $t\leq u$.

(**) Para $r\leq s$ e $t\leq u$. São úteis os seguintes resultados, onde F(ab) e S(ab) são expressões envolvendo os índices a e b (que variam num mesmo domínio contendo r), sendo a última simétrica, isto é, S(ab)=S(ba):

$$\sum_{\substack{ab\\(a\leq b)}}\delta_{br}\,F(ab)=\sum_{\substack{a\\(a\leq r)}}F(ar)\ ,\quad \sum_{\substack{ab\\(a\leq b)}}\delta_{ar}\,F(ab)=\sum_{\substack{b\\(b\geq r)}}F(rb)\ ,$$

$$\sum_{\substack{ab\\(a\leq b)}}S(ab)=\sum_{ab}\frac{1+\delta_{ab}}{2}S(ab)\ ,\quad \sum_{ab}S(ab)\left[F(ab)+F(ba)\right]=$$

$$2\sum_{ab}S(ab)\,F(ab)\ ,\quad \sum_{\substack{ab\\(a\leq b)}}\left[F(ab)+F(ba)\right]=\sum_{ab}(1+\delta_{ab})\,F(ab)\ ,$$

$$W^{(-\Omega)}_{cd\,ab}=W^{(\Omega)\,*}_{ab\,cd}\ ,\quad \Gamma^{(\Omega)}_{ab\,cd}=\bar{\Gamma}^{(\Omega)}_{cd\,ab}=\Gamma^{(\Omega)\,\dagger}_{cd\,ab}\quad e$$

$$W^{(\Omega)}_{ab\,cd}\,\Gamma^{(\Omega)}_{cd\,ab}=W^{(\Omega)}_{ba\,cd}\,\Gamma^{(\Omega)}_{cd\,ba}=W^{(\Omega)}_{ab\,dc}\,\Gamma^{(\Omega)}_{dc\,ab}\ .$$

$$\mathcal{V}^{(\Lambda-)}_{rstu} = \delta_{rt}\,\delta_{su}\sum_a (W_{ar}+W_{as})\,\langle\phi|N_a|\phi\rangle$$

$$-\delta_{rt}\,\delta_{su}\,\mathcal{R}e\sum_a\left\{\frac{1+\delta_{ar}}{[r]}\sum_{\substack{cd:\Omega\\(c\le d)}}[\Omega]\,W^{(\Omega)}_{arcd}\,\langle\phi|\Gamma^{(\Omega)}_{cdar}|\phi\rangle\right.$$

$$\left.+\frac{1+\delta_{as}}{[s]}\sum_{\substack{cd:\Omega\\(c\le d)}}[\Omega]\,W^{(\Omega)}_{ascd}\,\langle\phi|\Gamma^{(\Omega)}_{cdas}|\phi\rangle\right\}$$

$$+W^{(\Lambda)}_{rstu}\,\langle\phi|(1-\rho_r-\rho_s-\rho_t-\rho_u)|\phi\rangle$$

$$+\zeta_{rs}\zeta_{tu}\phi_{rs\Lambda}\phi_{tu\Lambda}\sum_{bc\nu\Omega}\frac{[\Omega\nu]}{\zeta_{rb}\zeta_{tb}\zeta_{cu}\zeta_{cs}}\begin{Bmatrix}\mu & \Omega & c\\ \Lambda & r & s\\ t & b & \nu\end{Bmatrix}W^{(\Omega)}_{rbcu}\,\langle\phi|\Gamma^{(\nu)}_{cstb}|\phi\rangle\,, \qquad \text{(IV.107)}$$

onde usamos a definição (III.46) para W_{ac} e o símbolo $\mathcal{R}e$ indica que deve ser tomada a parte real da expressão que o segue, podendo, na prática, ser ignorado, pois adotamos sempre uma convenção de fases na qual os elementos de matriz da interação efetiva e a densidade de duas partículas no estado-pai são grandezas reais. É interessante observar que as contribuições estritamente diagonais em (IV.107), ou seja, as duas primeiras, são independentes de Λ.

A matriz principal é obtida adicionando-se as contribuições (IV.105) e (IV.107):

$$\mathcal{H}^{(\Lambda-)}_{rstu} = \mathcal{K}^{(\Lambda-)}_{rstu} + \mathcal{V}^{(\Lambda)}_{rstu}\,. \qquad \text{(IV.108)}$$

IV-5.3) MATRIZ DE CORREÇÃO

De novo calculamos separadamente as contribuições de K e V, obtendo para elas

$$k^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = \sum_a \varepsilon_a \frac{\langle\phi|\left(Z^{\Lambda}_{tu} N_a \bar{Z}^{\Lambda}_{rs}\right)^0|\phi\rangle}{[\Lambda]^{1/2}} \qquad \text{(IV.109)}$$

e

$$v^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = \sum_{\substack{abcd:\Omega \\ (a\le b,\, c\le d)}} W^{(\Omega)}_{abcd} \left[\frac{\Omega}{\Lambda}\right]^{1/2} \langle\phi|\left(Z^{\Lambda}_{tu}\left(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd}\right)^0 \bar{Z}^{\Lambda}_{rs}\right)^0|\phi\rangle \qquad \text{(IV.110)}$$

respectivamente, onde usamos as equações (IV.79), (IV.82) e (IV.89).

A matriz de correção é obtida por adição:

$$h^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = k^{(\Lambda)}_{rs\,tu} + v^{(\Lambda)}_{rs\,tu} \,. \qquad \text{(IV.111)}$$

Das equações acima vemos que $h^{(\Lambda)}_{rs\,tu}$ se anula se o estado-pai não contém mais que duas partículas ativas.

Para finalizar este capítulo observemos que, embora as equações de movimento sejam potencialmente exatas, são quase sempre introduzidas duas aproximações importantes:

1º) O estado-pai ϕ pode não ser um auto-estado de H (ou H), satisfazendo, em lugar de (IV.16), tão somente

$$\langle\phi|H|\phi\rangle = 0 \,. \qquad \text{(IV.112)}$$

2º) Ao expandirmos os operadores de excitação, truncamos, em geral, o espaço. Por exemplo: se o estado ϕ tiver senioridade nula, a expansão (IV.83) limita os estados finais aos de senioridade zero ou dois conforme Λ represente um momento angular nulo ou diferente de zero.

CAPÍTULO V

ESTADOS COM SENIORIDADE NULA DA HAMILTONIANA DE EMPARELHAMENTO

V-1) INTRODUÇÃO

A primeira aplicação que faremos das equações de movimento obtidas no capítulo anterior será ao problema do emparelhamento. Nesse caso a senioridade é um bom número quântico, o que torna praticável a diagonalização exata da hamiltoniana mesmo para tanto quanto seis partículas ativas, possibilitando, pela comparação com os nossos resultados, estabelecer a qualidade das aproximações aqui feitas.

Nos limitaremos aos estados com senioridade nula e resolveremos sucessivamente os problemas de 2, 4 e 6 partículas* ativas, obtendo os estados-pai por recorrência: para 2 partículas ativas ele é o vácuo; para 4, o estado fundamental obtido no problema anterior e assim por diante. Nas aplicações aos isótopos pares do chumbo tomaremos para espaço-modelo, conforme o caso, a camada imediatamente acima ou imediatamente abaixo do número mágico N = 126, cujos orbitais estão indicados na tabela 1.

Na seção V-2 obtemos equações de movimento específicas para emparelhamento e, na seção V-3, as aplicamos ao modelo degenerado, obtendo expressões fechadas para as diversas grandezas. Passamos então à comparação dos nossos resultados com os da diagonalização exata da hamiltoniana de emparelhamento: pri

---

(*) Em alguns casos essas "partículas" são, na verdade, buracos. As equações permanecem as mesmas.

meiramente, na seção V-4, para um espaço-modelo com dois orbitais e depois, na seção V-5, com cinco. Finalmente, na seção V-6, comparamos nossos resultados com os da teoria MTDA para vibrações de emparelhamento e comentamos as limitações desta.

V-2) EQUAÇÕES DE MOVIMENTO PARA VIBRAÇÕES DE EMPARELHAMENTO

Vamos obter aqui as equações de movimento para a transferência de dois nêutrons acoplados a $J^{\pi}=0^{+}$ em núcleos-alvo par-par próximos a camadas fechadas. No caso particular importante em que o núcleo residual é deixado no seu estado fundamental, há coletividade em relação a essas reações e o modo coletivo correspondente denomina-se vibração de emparelhamento (Boh 68).

Como se sabe, os estados fundamentais de núcleos par-par têm predominantemente senioridade nula e, se os prótons estão em camadas fechadas, as correlações entre os nêutrons são bem reproduzidas pela hamiltoniana de emparelhamento

$$H = \sum_{a} e_a N_a - \frac{G}{2} \sum_{ac} [ac]^{1/2} Z_a \bar{Z}_c \,, \qquad \text{(V.1)}$$

onde e_a é a energia de partícula-única do orbital $a = n_a l_a j_a$, G é a intensidade da interação de emparelhamento,

$$Z_a = Z^{0}_{aa} \qquad \text{(V.2)}$$

e

$$\bar{Z}_a = \bar{Z}^{0}_{aa} = Z^{\dagger}_{a} \,. \qquad \text{(V.3)}$$

Comparando-se as equações (V.1) e (III.31-33), vê-se que, para a

interação de emparelhamento,

$$W^{(\Gamma)}_{abcd} = -\frac{G}{2}\,[ac]^{1/2}\,\delta_{ab}\,\delta_{cd}\,\delta_{0\Gamma}\,. \qquad (V.4)$$

Para que a fase desses elementos de matriz seja constante, no entanto, é necessário escolher para funções angulares dos diversos orbitais $i^{\ell}\,Y_{\ell\hat{\ell}}(\theta,\varphi)$, o que faremos neste capítulo.

Aproximamos, então, a hamiltoniana nuclear por (V.1), que uma vez modificada segundo (IV.14, 16) passa a

$$H = K + V\,, \qquad (V.5)$$

com

$$K = \sum_a \varepsilon_a\, N_a\,, \qquad (V.6)$$

$$\varepsilon_a = e_a - \mu\,, \qquad (V.7)$$

$$\mu = \frac{\langle\phi|H|\phi\rangle}{\langle\phi|N|\phi\rangle} \quad \text{ou} \quad 0 \qquad (V.8)$$

e

$$V = -\frac{G}{2}\sum_{ac}[ac]^{1/2}\,Z_a\,\overline{Z}_c\,. \qquad (V.9)$$

Não são, no presente caso, necessárias as equações de movimento acopladas, bastando as de seção IV-3 e, já que estamos interessados somente em estados com senioridade nula, tomamos os Z_t para operadores de base ($\eta_i^{\dagger}$ em (IV.20)), escrevendo para os operadores de excitação:

$$\mathcal{O}^{\dagger} = \sum_{t} X_t \, Z_t \, . \tag{V.10}$$

As componentes X_t são soluções da equação de autovalores relativos

$$\sum_{t} \mathcal{H}_{rt} \, X_t = E \sum_{t} \mathcal{M}_{rt} \, X_t \, , \tag{V.11}$$

sujeitas à condição

$$\sum_{rt} X_r^{*} \, \mathcal{M}_{rt} \, X_t \neq 0 \, . \tag{V.11'}$$

A matriz-métrica é, neste caso,

$$\mathcal{M}_{rt} = \langle \phi | \, \bar{Z}_r \, Z_t \, | \phi \rangle \tag{V.12}$$

e

$$\mathcal{H}_{rt} = \langle \phi | \, \bar{Z}_r \, H \, Z_t \, | \phi \rangle \tag{V.13}$$

é a matriz de energia, que pode ser decomposta como

$$\mathcal{H}_{rt} = \mathcal{H}_{rt}^{(-)} - h_{rt} \, , \tag{V.14}$$

em termos da matriz principal

$$\mathcal{H}_{rt}^{(-)} = \langle \phi | \, [\bar{Z}_r \, , H \, , Z_t \,] \, | \phi \rangle \tag{V.15}$$

e da matriz de correção

$$h_{rt} = \langle \phi | \, Z_t \, H \, \bar{Z}_r \, | \phi \rangle \, . \tag{V.16}$$

As soluções de (V.11, 11'), normalizadas conforme

$$\sum_{rt} X_r^{(i')*} \mathcal{M}_{rt} X_t^{(i)} = \delta_{i'i} \,, \tag{V.17}$$

correspondem operadores de excitação,

$$\mathcal{O}_i^\dagger = \sum_t X_t^{(i)} Z_t \,, \tag{V.18}$$

que criam estados,

$$|\psi_i\rangle = \mathcal{O}_i^\dagger |\phi\rangle \,, \tag{V.19}$$

ortonormais, isto é,

$$\langle \psi_{i'} | \psi_i \rangle = \langle \phi | \mathcal{O}_{i'} \mathcal{O}_i^\dagger | \phi \rangle = \delta_{i'i} \,. \tag{V.20}$$

Os autovalores relativos em (V.11) estão relacionados com a energia conforme (IV.40):

$$\begin{aligned} E_i &= \left(\langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) - \mu \left(\langle \psi_i | N | \psi_i \rangle - \frac{\langle \phi | N | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) \\ &= \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle - \mu \langle \psi_i | N | \psi_i \rangle \,, \end{aligned} \tag{V.21}$$

ou seja,

$$E_i = \langle \psi_i | H | \psi_i \rangle = E_i + \mu \langle \psi_i | N | \psi_i \rangle \,. \tag{V.22}$$

Pelo que vimos na seção IV-5, as amplitudes espectroscópicas para as correspondentes reações de transferência de dois nêu - trons são, neste caso, as próprias amplitudes de excitação

$$\lambda_r^{(i)} = \sum_t \mathcal{M}_{rt} X_t^{(i)} \quad . \tag{V.23}$$

As mesmas observações feitas no final daquela seção sobre o caráter aproximado desses resultados é pertinente aqui.

Damos a seguir expressões para o cálculo de $\mathcal{M}_{rt}$, $\mathcal{H}_{rt}^{(-)}$ e h_{rt}. Elas envolvem o vetor (não-normalizado)

$$|\phi'\rangle = \sum_c [c]^{1/2} \overline{Z}_c |\phi\rangle \quad , \tag{V.24}$$

obtido do estado-pai pela aniquilação de um par completamente correlacionado.

V-2.1) MATRIZ-MÉTRICA

Partindo da identidade

$$\overline{Z}_r Z_t = [\overline{Z}_r, Z_t] + Z_t \overline{Z}_r \tag{V.25}$$

e do resultado (III.134), obtemos para a matriz-métrica:

$$\mathcal{M}_{rt} = \delta_{rt} \langle\phi|(1 - 2\rho_r)|\phi\rangle + \langle\phi|\Gamma_{rt}|\phi\rangle \quad , \tag{V.26}$$

onde

$$\Gamma_{rt} = \Gamma^{(0)}_{rr\,tt} = Z_t \overline{Z}_r \quad . \tag{V.27}$$

V-2.2) MATRIZ PRINCIPAL

A contribuição de K para a matriz principal é

$$\mathcal{K}^{(-)}_{rt} = \sum_a \varepsilon_a \langle\phi|[\bar{Z}_r, N_a, Z_t]|\phi\rangle \ , \qquad (V.28)$$

que, pelo resultado (III.135), também se escreve

$$\mathcal{K}^{(-)}_{rt} = \delta_{rt} \cdot 2\varepsilon_r \langle\phi|(1-2\rho_r)|\phi\rangle \ . \qquad (V.29)$$

Para a contribuição de V temos

$$\mathcal{V}^{(-)}_{rt} = -\frac{G}{2} \sum_{ac} [ac]^{1/2} \langle\phi|[\bar{Z}_r, Z_a \bar{Z}_c, Z_t]|\phi\rangle \qquad (V.30)$$

ou, pelo resultado (III.136),

$$[\bar{Z}_r, Z_a \bar{Z}_c, Z_t] = \delta_{ra}\,\delta_{ct}\left(1-2\frac{N_r}{[r]}\right)\left(1-2\frac{N_t}{[t]}\right) - \frac{2}{[r]}\delta_{rt}(\delta_{ra}+\delta_{ct})\, Z_a \bar{Z}_c \ , \qquad (V.31)$$

ainda,

$$\mathcal{V}^{(-)}_{rt} = \delta_{rt}\frac{2G}{[r]^{1/2}} \mathcal{R}e\langle\phi|Z_r|\phi'\rangle - \frac{G}{2}[rt]^{1/2}\langle\phi|(1-2\rho_r)(1-2\rho_t)|\phi\rangle \ . \qquad (V.32)$$

O primeiro termo no segundo membro dessa equação corresponde ao segundo em (IV.107) e o último à soma dos outros três. O

símbolo $\mathcal{R}e$ pode ser ignorado pois, com a nossa escolha de fases, todas as grandezas são reais.

A matriz principal é obtida por adição:

$$\mathcal{H}^{(-)}_{rt} = \mathcal{K}^{(-)}_{rt} + \mathcal{V}^{(-)}_{rt} \quad . \tag{V.33}$$

V-2.3) MATRIZ DE CORREÇÃO

As contribuições de K e V são

$$k_{rt} = \sum_a \varepsilon_a \langle \phi | Z_t N_a \bar{Z}_r | \phi \rangle \tag{V.34}$$

e

$$v_{rt} = -\frac{G}{2} \langle \phi' | \Gamma_{rt} | \phi' \rangle \tag{V.35}$$

respectivamente, de modo que

$$h_{rt} = k_{rt} + v_{rt} \quad . \tag{V.36}$$

Essa matriz se anula caso o estado-pai não contenha mais que duas partículas ativas.

V-3) MODELO DEGENERADO

Neste caso a expansão (V.10) não introduz nenhuma aproximação e os resultados coincidem com a solução exata, bem conhecida (Row 70, c.11). O objetivo é ganharmos familiaridade com as diversas grandezas.

Como temos um único orbital, cuja degenerescência é

$$[r] = 2\,\Omega \ , \tag{V.37}$$

podemos omitir os índices nas equações da seção V-2. Em particular as matrizes de energia e métrica são unidimensionais e a equação de autovalores relativos (V.11) escreve-se simplesmente

$$\mathcal{H}\,X = E\,\mathcal{M}\,X \ , \tag{V.38}$$

tendo para solução

$$E = \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{M}} \ . \tag{V.39}$$

A correspondente energia é

$$E = \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{M}} + \mu\,N \ , \tag{V.40}$$

conforme a equação (V.22). Por sua vez, a condição de ortonormalidade (V.17) dá para a componente:

$$X = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{M}}} \ , \tag{V.41}$$

resultando para a amplitude de excitação:

$$\mathcal{S} = \sqrt{\mathcal{M}} \tag{V.42}$$

em vista de (V.23).

Notando que no presente caso

$$|\phi'\rangle = \sqrt{2\Omega}\ \bar{Z}\,|\phi\rangle \ , \tag{V.43}$$

podemos escrever

$$\mathcal{M} = \langle\phi|\left(1 - \frac{N}{\Omega}\right)|\phi\rangle + \langle\phi|\, Z\,\bar{Z}\,|\phi\rangle \ , \tag{V.44}$$

$$\mathcal{K}^{(-)} = 2\,\varepsilon\,\langle\phi|\left(1 - \frac{N}{\Omega}\right)|\phi\rangle \ , \tag{V.45}$$

$$\mathcal{V}^{(-)} = 2\,G\,\mathcal{R}e\,\langle\phi|\, Z\,\bar{Z}\,|\phi\rangle - G\Omega\,\langle\phi|\left(1 - \frac{N}{\Omega}\right)^2|\phi\rangle, \tag{V.46}$$

$$k = \varepsilon\,\langle\phi|\, Z\, N\,\bar{Z}\,|\phi\rangle \tag{V.47}$$

e

$$v = -\,G\Omega\,\langle\phi|\, Z^2\,\bar{Z}^2\,|\phi\rangle \tag{V.48}$$

Os valores de espera no estado-pai podem ser facilmente calculados com o auxílio dos resultados (C.9 , C.13, C.15).

Para 2 partículas ativas o estado-pai é o vácuo, e a matriz-métrica é

$$\mathcal{M}(2) = 1 \ , \tag{V.49}$$

resultando

$$X(2) = 1 \tag{V.50}$$

e

$$\mathcal{S}(2) = 1 \ . \tag{V.51}$$

A energia por partícula é

$$\mu(2) = 0 \tag{V.52}$$

e escolhendo, como é usual,

$$e = 0 \quad , \tag{V.53}$$

temos

$$\varepsilon(2) = e - \mu(2) = 0. \tag{V.54}$$

A matriz de correção neste caso se anula,

$$h(2) = 0, \tag{V.55}$$

e as demais contribuições para a matriz de energia são

$$\mathcal{K}^{(-)}(2) = 0 \tag{V.56}$$

e

$$\mathcal{V}^{(-)}(2) = -G\Omega \ . \tag{V.57}$$

Portanto

$$\mathcal{H}(2) = \mathcal{H}^{(-)}(2) = -G\Omega \tag{V.58}$$

e

$$E(2) = -G\Omega \ . \tag{V.59}$$

Temos, assim, para o estado fundamental de 2 partículas ativas,

$$|2\rangle = Z\,|0\rangle \tag{V.60}$$

e, para sua energia,

$$E(2) = -G\Omega\ . \tag{V.61}$$

Passando a 4 partículas ativas, escolhemos $|2\rangle$ para o estado-pai, resultando

$$M(4) = 2\left(1-\frac{1}{\Omega}\right)\ , \tag{V.62}$$

$$X(4) = \frac{1}{\sqrt{2\left(1-\frac{1}{\Omega}\right)}} \tag{V.63}$$

e

$$s(4) = \sqrt{2\left(1-\frac{1}{\Omega}\right)}\ . \tag{V.64}$$

A energia por partícula é, agora,

$$\mu(4) = \frac{E(2)}{2} = -\frac{G\Omega}{2}\ ; \tag{V.65}$$

portanto

$$\varepsilon(4) = \frac{G\Omega}{2} \tag{V.66}$$

e resultam, para a matriz principal, as contribuições

$$K^{(-)}(4) = G\Omega\left(1-\frac{2}{\Omega}\right) \tag{V.67}$$

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
SERVIÇO DE BIBLIOTECA E INFORMAÇÃO
519
INSTITUTO DE FÍSICA

e

$$\mathcal{V}^{(-)}(4) = 2G - G\Omega\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right)^2 . \qquad \text{(V.68)}$$

Sendo nula a matriz de correção,

$$h(4) = 0 , \qquad \text{(V.69)}$$

temos, para a matriz de energia,

$$\mathcal{H}_0(4) = \mathcal{H}^{(-)}(4) = 4G\left(1 - \frac{1}{\Omega}\right) \qquad \text{(V.70)}$$

e, para o seu autovalor,

$$E_0(4) = 2G . \qquad \text{(V.71)}$$

Portanto, ao estado fundamental

$$|4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\left(1 - \frac{1}{\Omega}\right)}} Z^2 |0\rangle \qquad \text{(V.72)}$$

corresponde a energia

$$E(4) = E_0(4) + 4\mu(4) = -2G(\Omega - 1) . \qquad \text{(V.73)}$$

Finalmente, para 6 partículas ativas o estado-pai é $|4\rangle$ e

$$M(6) = 3\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right) , \qquad \text{(V.74)}$$

$$X(6) = \frac{1}{\sqrt{3\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right)}} \qquad \text{(V.75)}$$

e

$$s(6) = \sqrt{3\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right)} \quad . \tag{V.76}$$

A energia por partícula é

$$\mu(6) = \frac{E(4)}{4} = -\frac{G}{2}(\Omega - 1), \tag{V.77}$$

e

$$\varepsilon(6) = \frac{G}{2}(\Omega - 1), \tag{V.78}$$

resultando as seguintes contribuições para a matriz de energia:

$$\mathcal{K}^{(-)}(6) = G(\Omega-1)\left(1 - \frac{4}{\Omega}\right), \tag{V.79}$$

$$\mathcal{V}^{(-)}(6) = 4G\left(1 - \frac{1}{\Omega}\right) - G\Omega\left(1 - \frac{4}{\Omega}\right)^2, \tag{V.80}$$

$$k(6) = 2G(\Omega-1)\left(1 - \frac{1}{\Omega}\right) \tag{V.81}$$

e

$$v(6) = -2G(\Omega-1) \quad . \tag{V.82}$$

Assim, temos para a matriz principal

$$\mathcal{H}^{(-)}(6) = 8G\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right) - G, \tag{V.83}$$

para a matriz de correção

$$h(6) = -G\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right) - G \tag{V.84}$$

e para a matriz de energia

$$\mathcal{H}(6) = 9G\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right) . \qquad (V.85)$$

Seu autovalor é

$$E(6) = 3G , \qquad (V.86)$$

correspondendo a energia

$$E(6) = E'(6) + 6\mu(6) = -3G(\Omega - 2) \qquad (V.87)$$

ao estado fundamental

$$|6\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\cdot 3\cdot\left(1-\frac{1}{\Omega}\right)\left(1-\frac{2}{\Omega}\right)}}\, Z^3\,|0\rangle . \qquad (V.88)$$

Note-se que embora a matriz de correção se anule para 2 e 4 partículas ativas, para 6 ela contribui com aproximadamente 20% ($\Omega \gg 1$) para o valor de E, não podendo, pois, ser desprezada.

Conforme já mencionamos na seção V-2, as amplitudes espectroscópicas para reações de transferência de dois nêutrons são as próprias amplitudes de excitação e, no presente caso, as respectivas seções de choque são proporcionais aos quadrados dessas amplitudes. Para os estados finais com 2, 4 e 6 partículas ativas elas guardam, portanto, entre si, a proporção

$$1 : 2\left(1 - \frac{1}{\Omega}\right) : 3\left(1 - \frac{2}{\Omega}\right) , \qquad (V.89)$$

ou, aproximadamente,

$$1 : 2 : 3 , \qquad (V.90)$$

como se pode ver nas equações (V.5.1), (V.6.4) e (V.7.6), supondo que

$\Omega \gg 1$. Essa proporcionalidade da seção de choque com o número de partículas ativas ilustra a coletividade a que nos referimos no início daquela seção.

V-4) MODELO DE DOIS ORBITAIS

Neste caso, exceto para duas partículas ativas, há aproximações envolvidas nas equações de movimento e, para avaliar seu efeito, resolvemos, tanto exatamente (*) como pelas equações da seção V-2, os problemas de 2, 4 e 6 partículas ativas interagindo com emparelhamento de G = 0,0865 MeV nos orbitais $1g_{9/2}$ e $0i_{11/2}$ com energias de partícula-única iguais a 0 e 0,79 MeV respectivamente.

Os resultados encontram-se na figura 1 e na tabela 2, onde vemos que as energias absolutas concordam perfeitamente em todos os casos. Chamemos a atenção para que, mesmo nos limitando à senioridade nula, nem todos os estados são fornecidos pelas equações de movimento. Esse é o preço a pagar pela forte redução do número de configurações permitidas, responsável pela simplicidade do nosso método. Em compensação os estados obtidos são os de energia mais baixa, precisamente aqueles nos quais estamos mais interessados.

Não dispondo das funções de onda exatas, não podemos, infelizmente, compará-las com as nossas. Damos, porém, na tabela 3, as componentes e as amplitudes de excitação obtidas diretamente das equações de movimento. Vê-se que as amplitudes espectroscópicas para os estados fundamentais aumentam gradativa

(*) Para a solução exata usamos um programa de computador, já existente, preparado por H.T. Chen para cálculos de emparelhamento incluindo o isospin.

mente com o número de partículas ativas, enquanto para os excitados elas decrescem ligeiramente, mostrando que somente aqueles são coletivos (vibrações de emparelhamento).

V-5) ^{206,204,202}Pb COM EMPARELHAMENTO

Richardson e Sherman calcularam exatamente (RiS 64) as energias dos estados mais baixos com senioridade nula dos isótopos ^{206,204,202}Pb num modelo em que 2, 4 e 6 buracos de nêutrons interagem com emparelhamento de G = 0,146 MeV nos cinco orbitais mais baixos da camada que fecha para N = 126 (ver tabela 1). Resolvemos aqui o mesmo problema usando as equações da seção V-2 e comparamos as energias absolutas na tabela 4 e na figura 2. A concordância é excelente, sendo perfeita para as energias dos estados fundamentais, e a única discrepância sensível é de 0,12 MeV na energia de um estado excitado do ^{204}Pb.

Já comentamos no final da seção V-3 a importância de incluir a matriz de correção h_{rt} quando o estado-pai tem mais de duas partículas ou buracos ativos. Como um teste numérico, refizemos os cálculos para o ^{202}Pb, cujo estado-pai tem quatro buracos ativos, desprezando desta vez a matriz de correção, isto é, aproximando a equação (V.14) por

$$\mathcal{H}_{rt} \simeq \mathcal{H}^{(-)}_{rt} \,. \qquad (V.91)$$

Os resultados estão comparados com os anteriores na tabela 5. Vê-se que as energias são razoavelmente afetadas; em particular, a energia do estado fundamental é inferior em 0,17 MeV à obtida incluindo-se a matriz de correção, que concorda com o

valor exato, como vimos anteriormente. O cálculo perde, portanto, o seu caráter variacional. Quanto à função de onda, vê-se que as componentes são bastante afetadas (10% a 45%), porém as amplitudes o são apenas ligeiramente (0,1% a 4%).

V-6) COMPARAÇÃO COM A MTDA

Finalizamos este capítulo com uma comparação das equações de movimento aqui deduzidas com a teoria MTDA ("Modified Tamm-Dancoff Approximation") para vibrações de emparelhamento proposta por Goswami e Nalcioğlu (GoN 70) e aplicada ao chumbo por Gosh e Goswami (GhG 72), que apresentamos brevemente abaixo.

Admitindo que o estado fundamental $|N\rangle$ de N partículas ativas (sendo N um número par) seja coletivo com respeito à vibração de emparelhamento correspondente ao operador de fônon

$$O'^{\dagger} = \sum_r X'_r Z_r \ , \qquad (V.92)$$

Goswami e Nalcioğlu, semelhantemente a nós, supõem que $|N\rangle$ possa ser aproximadamente obtido de $|N-2\rangle$ por

$$|N\rangle = \beta(N)\, O'^{\dagger} |N-2\rangle \ , \qquad (V.93)$$

onde $\beta(N)$ é uma constante de normalização. Porém, em vez de determinarem as componentes X'_r em (V.92) variacionalmente, eles as identificam com as amplitudes de excitação, isto é,

postulam que (*)

$$X'_r \simeq \langle N | Z_r | N-2 \rangle^* . \qquad (V.94)$$

Como $|N\rangle$ e $|N-2\rangle$ são auto-estados de H, então

$$\langle N | [H, Z_r] | N-2 \rangle = \omega(N) \langle N | Z_r | N-2 \rangle , \qquad (V.95)$$

onde definiu-se

$$\omega(N) = E(N) - E(N-2) . \qquad (V.96)$$

Por outro lado, se H for a hamiltoniana de emparelhamento (V.1), então

$$[H, Z_r] = 2 e_r Z_r - \frac{G}{2} \sum_a [a]^{1/2} Z_a (1 - 2\rho_r) [r]^{1/2} , \qquad (V.97)$$

como se obtém facilmente das equações (III.132) e (III.134), com a definição (III.27),

$$\rho_r = \frac{N_r}{[r]} , \qquad (V.98)$$

para a densidade de uma partícula. Introduzindo (V.97) em (V.95), chega-se a

$$[2 e_r - \omega(N)] \langle N | Z_r | N-2 \rangle = \frac{G}{2} \sum_a [a]^{1/2} \langle N | Z_a (1 - 2\rho_r) | N-2 \rangle [r]^{1/2} . \qquad (V.99)$$

(*) A conjugação complexa em (V.94) pode, na prática, ser omitida, pois as fases são escolhidas de modo que as amplitudes sejam reais.

Goswami e Nalcioğlu fazem nesse ponto a aproximação de bosons para os criadores de pares:

$$[\bar{Z}_r, Z_s]\,|N-2\rangle = \delta_{rs}\,(1-2\rho_r)\,|N-2\rangle$$

$$\simeq \delta_{rs}\,|N-2\rangle\,[1-2\rho_r(N-2)]\,, \qquad \text{(V.100)}$$

que permite reescrever a equação acima na forma

$$\langle N|\,Z_r\,|N-2\rangle \simeq \frac{[r]^{1/2}\,[1-2\,\rho_r(N-2)]}{2\,e_r - \omega(N)}\;\Delta(N)\,, \qquad \text{(V.101)}$$

onde se introduziu o parâmetro de "gap" (*)

$$\Delta(N) = \frac{G}{2}\sum_a [a]^{1/2}\,\langle N|\,Z_a\,|N-2\rangle\,. \qquad \text{(V.102)}$$

Multiplicando-se (V.101) por $[r]^{1/2}$ e somando-se sobre todos os orbitais, obtém-se a equação secular

$$\frac{2}{G} \simeq \sum_r \frac{[r]\,[1-2\rho_r(N-2)]}{2\,e_r - \omega(N)}\,. \qquad \text{(V.103)}$$

As amplitudes de excitação ficam determinadas por (V.101) a menos que uma constante multiplicativa, que Goswami e Nalcioğlu calculam observando que os operadores de fônon devem se comportar aproximadamente como bosons, isto é,

$$[O', O'^{\dagger}] \simeq 1\,. \qquad \text{(V.104)}$$

Tem-se então

(*) O "gap parameter" de Goswami e colaboradores (GoN 70, GhG 72) difere deste por um fator igual à $\sqrt{2}$.

$$\langle N-2|[\mathcal{O}', \mathcal{O}'^{\dagger}]|N-2\rangle \simeq 1 \quad , \tag{V.105}$$

ou seja,

$$\sum_r |\langle N|Z_r|N-2\rangle|^2 [1 - 2\rho_r(N-2)] \simeq 1 \quad . \tag{V.106}$$

As equações (V.103), (V.101) e (V.106) permitem calcular as energias de N partículas ativas desde que se conheçam as ocupações relativas, $\rho_r(N-2)$, no estado fundamental de N-2 partículas. Como nós, Goswami e Nalcioğlu as calculam por re - corrência, partindo do vácuo e obtendo os estados fundamentais para 2, 4, 6 etc. partículas ativas por meio de (V.93), sendo as constantes $\beta(N)$ determinadas pela condição

$$\sum_r [r]\rho_r(N) = N \quad . \tag{V.107}$$

Com essa breve exposição vimos que a teoria MTDA para vibrações de emparelhamento é bastante semelhante à nossa (seção V-2). Ela envolve, porém, duas aproximações a mais: a aproximação de bosons (V.100) para os criadores de pares e a aproximação (V.94) para as componentes X'_r dos operadores de fônon. Esta última equivale a supor que a matriz métrica é uma matriz constante, mais precisamente, que

$$\mathcal{M}_{rs}(N) \simeq \frac{\delta_{rs}}{\beta(N)} \quad . \tag{V.108}$$

(Para vê-lo, basta notar que

$$\langle N|Z_r|N-2\rangle^* = \langle N-2|\bar{Z}^r|N\rangle$$

$$= \beta(N) \sum_s \langle N-2|\bar{Z}_r Z_s|N-2\rangle X'_s \qquad \text{(V.109)}$$

e lembrar a definição (V.12) da matriz-métrica). Ambas as aproximações violam o princípio de Pauli e só se justificam se as ocupações relativas $\rho_r(N-2)$ dos diversos orbitais forem pequenas, valendo exatamente se elas forem nulas (vácuo).

As energias e as funções de onda, estas através dos parâmetros de "gap" (V.102), obtidas para isótopos pares do chumbo por Ghosh e Goswami (GhG 72) com a MTDA e aqui com as equações de movimento da seção V-2 são comparadas na tabela 6. Usou-se uma intensidade de emparelhamento de G = 0,0865 MeV e se tomou para espaço-modelo os orbitais de uma única camada com as energias de partícula-única de True, Ma e Pinkston (Tru+ 71), reproduzidas na tabela 1. Os resultados concordam obrigatoriamente para o ^{210}Pb e o ^{206}Pb (1 fônon), já que ambas as teorias coincidem neste caso com o cálculo exato. Para o ^{212}Pb (2 fônons) a concordância é muito boa para a energia mas apenas razoável para a função de onda, enquanto para o ^{204}Pb (também 2 fônons) a discordância é total. Como já sabemos que os nossos resultados são praticamente exatos (pelo menos para a energia), isso indica uma falha da MTDA, que é confirmada pela divergência do correspondente cálculo do parâmetro de "gap".

A causa disso é a pequena dimensão ($[1/2] = 2$) do orbital de mais baixa energia, 2 p 1/2 , que força a correspondente ocupação relativa no estado fundamental do ^{206}Pb a ser alta, precisamente 88,5% como se vê na tabela 7, tornando duvidosas as aproximações (V.100) e (V.108). Esta última, em par-

ticular, é totalmente injustificada no que diz respeito àquele orbital, como se pode ver na tabela 8. Já para o ^{212}Pb os resultados são bons porque os orbitais mais baixos têm, todos, dimensões grandes e, conseqüentemente, as ocupações relativas no estado fundamental do ^{210}Pb são pequenas, conforme mostra a tabela 9. Na tabela 10 vemos, ainda, que nesse caso a matriz-métrica é, com efeito, aproximadamente uma matriz constante.

CAPÍTULO VI

CÁLCULOS DE EQUAÇÕES DE MOVIMENTO COM UMA HAMILTONIANA REALÍSTICA

VI-1) INTRODUÇÃO

Para uma aplicação das equações de movimento do capítulo IV, nos decidimos pelos isótopos pares do chumbo. O ^{208}Pb é um dos melhores exemplos de um núcleo mágico e a região do chumbo tem sido uma das preferidas para cálculos de modelo de camadas (MaT 73;McK 75). Há também um grande número de informações experimentais (Fly+72; Mar 79; Tot 77; Web 79; Sch 79; Sch 78 ; Lan 77) . Poderemos assim comparar alguns de nossos resultados com os de cálculos teóricos mais completos e também com dados experimentais.

Devido ao excesso de nêutrons podemos considerá-los independentemente dos prótons não havendo necessidade de incluir o isospin nos cálculos. Como os estados-pai serão estados fundamentais de núcleos pares ($J^{\pi} = 0^{+}$), eles terão ordem tensorial nula e poderemos usar as equações da seção IV-5. Notemos que com a expansão (IV.83) dos operadores de excitação, só poderemos descrever estados dominados por componentes com senioridade mínima, isto é, zero para J=0 e dois para J≠0.

Nas seções VI-2 e VI-3 damos as expressões particulares da matriz-métrica e de energia em virtude do estado-pai ter senioridade nula. Na seção VI-4 explicamos qual a interação efetiva que usamos e nas seções VI-5 e VI-6 apresentamos os resultados.

VI-2) MATRIZ-MÉTRICA PARA ESTADOS COM SENIORIDADE NULA

Está mostrado no apêndice C que a densidade de duas partículas, definida em (III.28), tem a forma

$$\Gamma^{(\wedge)}_{ab\,cd} = \gamma_{ac}\,\delta_{\wedge 0}\,\delta_{ab}\,\delta_{cd} + \eta_{ab}\,\zeta^{2}_{ab}\,\phi_{ab\wedge}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd} + 0(v) \qquad \text{(VI.1)}$$

onde

$$\eta_{ab} = \begin{cases} \dfrac{N_a N_b}{[ab]} = \rho_a \rho_b & \text{se} \quad a \neq b \quad e \\ \\ \dfrac{N_a(N_a-2)}{[a]([a]-2)} & \text{se} \quad a = b \ , \end{cases} \qquad \text{(VI.2)}$$

$$\gamma_{ac} = \begin{cases} Z_c\,\overline{Z}_a & \text{se} \quad a \neq c \quad e \\ \\ \dfrac{1}{2}\left(N_a - [a]\,\eta_{aa}\right) & \text{se} \quad a = c \end{cases} \qquad \text{(VI.3)}$$

e 0(v) representa qualquer operador cujos elementos de matriz entre estados com senioridade nula se anulam. Vê-se também naquele apêndice que a densidade de duas partículas independe de $\eta_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$, o que resolve o problema do denominador zero que apareceria em (VI.2) para a = b = $\frac{1}{2}$. Se adotamos um ordenamento particular para os orbitais e levamos em conta as propriedades (III.85) e (III.75), podemos reescrever (VI.1) na forma mais simples(*):

$$\Gamma^{(\wedge)}_{rs\,tu} = \gamma_{rt}\,\delta_{\wedge 0}\,\delta_{rs}\,\delta_{tu} + \eta_{rs}\,\delta_{rt}\,\delta_{su} + 0(v) \ , \qquad \text{(VI.4)}$$

(*) Para r ≤ s e t ≤ u.

sempre se subentendendo que as configurações envolvidas na densidade de duas partículas são permitidas para fermions (caso contrário, pela definição (III.28) , obteríamos zero para a mesma).

Como, neste capítulo, iremos considerar apenas estados-pai com senioridade nula, a densidade de duas partículas será sempre dada por(*):

$$\langle\phi|\Gamma^{(\Lambda)}_{rstu}|\phi\rangle = \delta_{\Lambda 0}\,\delta_{rs}\,\delta_{tu}\langle\phi|\gamma_{rt}|\phi\rangle + \delta_{rt}\,\delta_{su}\langle\phi|\eta_{rs}|\phi\rangle \qquad \text{(VI.5)}$$

e a matriz-métrica por(*):

$$\langle\phi|\mathcal{M}^{(\Lambda)}_{rstu}|\phi\rangle = \delta_{rt}\,\delta_{su}\langle\phi|(1-\rho_r-\rho_s+\eta_{rs})|\phi\rangle$$

$$+\ \delta_{\Lambda 0}\,\delta_{rs}\,\delta_{tu}\langle\phi|\gamma_{rt}|\phi\rangle \quad , \qquad \text{(VI.6)}$$

onde usamos (IV.10$_3$). Para os valores não-nulos de Λ a matriz-métrica é, portanto, diagonal e independente desse valor, enquanto para $\Lambda = 0$ há outras contribuições, inclusive não diagonais, devido às correlações de pares existentes no estado-pai.

Vamos obter expressões para as densidades ρ_a, η_{ab} e γ_{ac} no estado-pai em termos das componentes dos operadores de excitação envolvidos. Para duas partículas o estado-pai é o vácuo e

$$\rho_a(0) = \eta_{ab}(0) = \gamma_{ac}(0) = 0 \ . \qquad \text{(VI.7)}$$

Passando a quatro partículas, o estado-pai é o estado fundamental de duas partículas :

(*) Para $r \leq s$ e $t < u$.

$$|2\rangle = \sum_r X_r(2)\, Z_r\, |0\rangle \ , \qquad \text{(VI.8)}$$

e obtém-se facilmente (*)

$$\rho_a(2) = \frac{2\,|X_a(2)|^2}{[a]} \ , \qquad \text{(VI.9)}$$

$$\eta_{a\,b}(2) = 0 \qquad \text{(VI.10)}$$

e

$$\gamma_{ac}(2) = X_a(2)\, X_c^*(2) \ . \qquad \text{(VI.11)}$$

Finalmente, para seis partículas o estado-pai é o estado fundamental obtido no problema para quatro partículas:

$$|4\rangle = \sum_r X_r(4)\, Z_r\, |2\rangle \qquad \text{(VI.12)}$$

ou, conforme (VI. 8),

$$|4\rangle = \sum_r \mu_{rr}\, \frac{Z_r^2}{2!}\, |0\rangle + \sum_{\substack{rs \\ (r<s)}} \mu_{rs}\, Z_r\, Z_s\, |0\rangle \ , \qquad \text{(VI.13)}$$

onde definimos

$$\mu_{rs} = X_r(4)\, X_s(2) + X_s(4)\, X_r(2) \ , \qquad \text{(VI.14)}$$

com a propriedade de simetria

$$\mu_{rs} = \mu_{sr} \ . \qquad \text{(VI.15)}$$

É fácil mostrar que para a ≠ b

(*) Também neste capítulo, os sinais de conjugação complexa podem ser ignorados na prática, pois adota-se uma convenção de fases na qual as grandezas são reais.

$$\eta_{ab}(4) = \frac{4|\mu_{ab}|^2}{[ab]} \quad , \tag{VI.16}$$

resultado esse que prevalece para a = b, pois

$$\eta_{aa}(4) = \frac{4(4-2)}{[a]([a]-2)} \cdot |\mu_{aa}|^2 \cdot \frac{\langle 0|\overline{Z}_a^2 Z_a^2|0\rangle}{(2!)^2} \tag{VI.17}$$

e, pela equação (C.15)

$$\eta_{aa}(4) = \frac{4|\mu_{aa}|^2}{[aa]} \quad . \tag{VI.18}$$

Por outro lado, usando a equação (C.12), temos

$$\overline{Z}_a|4\rangle = \sum_r \mu'_{ar} Z_r|0\rangle \quad , \tag{VI.19}$$

onde definimos

$$\mu'_{ar} = \mu_{ar}\left(1 - \frac{2\delta_{ar}}{[a]}\right) \quad , \tag{VI.20}$$

o que permite escrever

$$\langle 4|Z_c \overline{Z}_a|4\rangle = \sum_r \mu'_{ar} \mu'^{*}_{cr} \quad . \tag{VI.21}$$

Notando, agora, que

$$\gamma_{ac} = Z_c \overline{Z}_a - \delta_{ac}\eta_{aa} + O(v) \quad , \tag{VI.22}$$

temos

$$\gamma_{ac}(4) = \sum_r \mu'_{ar} \mu'^{*}_{cr} - \delta_{ac}\eta_{aa}(4) \quad . \tag{VI.23}$$

Finalmente, decorre de (VI.3) que

$$\begin{aligned} \rho_a(4) &= \frac{2}{[a]}\gamma_{aa}(4) + \eta_{aa}(4) \\ &= \frac{2}{[a]}\sum_r \mu'_{ar} \mu'^{*}_{ar} \quad . \end{aligned} \tag{VI.24}$$

VI-3) MATRIZ DE ENERGIA PARA ESTADOS-PAI COM SENIORIDADE NULA

Podemos fazer algumas simplificações na matriz de energia obtida na seção IV-5, devido à forma da densidade de duas partículas para estados-pai com senioridade nula:

$$\langle\phi|\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,cd}|\phi\rangle = \langle\phi|\gamma_{ac}|\phi\rangle\delta_{10}\delta_{ab}\delta_{cd} + \langle\phi|\eta_{ab}|\phi\rangle\zeta^{2}_{ab}\phi_{ab\Lambda}\delta_{ac}\delta_{bd} \quad . \tag{VI.25}$$

Comecemos pela matriz principal, cujas contribuições dependentes da densidade de duas partículas são a segunda e a última no segundo membro da equação (IV.107). Para a primeira delas obtemos facilmente(*)

$$-\delta_{rt}\delta_{su}\,\mathrm{Re}\sum_{a}\left\{\frac{1+\delta_{ar}}{[r]}\sum_{cd:\Omega}\frac{1+\delta_{cd}}{2}[\Omega]\,W^{(\Omega)}_{ar\,cd}\langle\phi|\Gamma^{(\Omega)}_{cd\,ar}|\phi\rangle\right.$$
$$\left.+\frac{1+\delta_{as}}{[s]}\sum_{cd:\Omega}\frac{1+\delta_{cd}}{2}[\Omega]W^{(\Omega)}_{as\,cd}\langle\phi|\Gamma^{(\Omega)}_{cd\,as}|\phi\rangle\right\} =$$

$$-\delta_{rt}\delta_{su}\sum_{a}[a]\left(\langle\phi|\eta_{ar}|\phi\rangle W_{ar} + \langle\phi|\eta_{as}|\phi\rangle W_{as}\right)$$

$$-2\delta_{rt}\delta_{su}\,\mathrm{Re}\sum_{c}\left(\frac{1}{[r]}W^{(0)}_{rr\,cc}\langle\phi|\gamma_{cr}|\phi\rangle + \frac{1}{[s]}W^{(0)}_{ss\,cc}\langle\phi|\gamma_{cs}|\phi\rangle\right) \quad , \tag{VI.26}$$

enquanto para a última os cálculos, um pouco mais longos, estão feitos no apêndice E, sendo o resultado final:

$$\zeta_{rs}\zeta_{tu}\phi_{rs\Lambda}\phi_{tu\Lambda}\sum_{bc\nu\Omega}\frac{[\Omega\,\nu]}{\zeta_{rb}\zeta_{tb}\zeta_{cu}\zeta_{cs}}\begin{Bmatrix} u & \Omega & c \\ \Lambda & r & s \\ t & b & \nu \end{Bmatrix}W^{(\Omega)}_{rbcu}\langle\phi|\Gamma^{(\nu)}_{cs\,tb}|\phi\rangle =$$

$$W^{(\Lambda)}_{rstu}\langle\phi|(\eta_{rt}+\eta_{ru}+\eta_{st}+\eta_{su})|\phi\rangle$$

$$-\delta_{rt}\delta_{su}\sum_{b}[b]\left(\langle\phi|\eta_{br}|\phi\rangle W_{sb} + \langle\phi|\eta_{bs}|\phi\rangle W_{rb}\right)$$

$$+\phi_{rs\Lambda}\phi_{tu\Lambda}F^{(\Lambda)}_{rstu}\frac{\langle\phi|\gamma_{st}|\phi\rangle}{[st]^{1/2}} \quad . \tag{VI.27}$$

(*) Usamos o terceiro resultado na nota de rodapé à pág. 86. O símbolo Re foi retirado da primeira soma no segundo membro de (VI.26), porque tanto $\langle\phi|\eta_{ab}|\phi\rangle$ como W_{ab} são obviamente reais independentemente da convenção de fases (ver equações (C.62) e (III.46)).

Nessas equações W_{ab} é a interação média entre os orbitais a e b definida em (III.46), $\oint_{ab\wedge}$ é o símbolo de anti-simetrização definido em (III.56) e $F^{(\wedge)}_{abcd}$ é a interação multipolar (III.42). Introduzindo os resultados (VI.26) e (VI.27) em (IV.107) e levando em conta (IV.105) e (IV.108), obtemos para a matriz principal (*)

$$\mathcal{H}^{(\wedge-)}_{rstu} = \delta_{rt}\delta_{su}\Big\{(\varepsilon_r+\varepsilon_s)\langle\phi|(1-\rho_r-\rho_s)|\phi\rangle + \sum_a [a]\langle\phi|(\rho_a-\eta_{ar}-\eta_{as})|\phi\rangle(W_{ar}+W_{as}) - 2\,\mathrm{Re}\sum_a\left(\frac{W^{(0)}_{rraa}\langle\phi|\gamma_{ar}|\phi\rangle}{[r]} + \frac{W^{(0)}_{ssaa}\langle\phi|\gamma_{as}|\phi\rangle}{[s]}\right)\Big\}$$

$$+ W^{(\wedge)}_{rstu}\langle\phi|(1-\rho_r-\rho_s-\rho_t-\rho_u+\eta_{rt}+\eta_{ru}+\eta_{st}+\eta_{su})|\phi\rangle$$

$$+ \oint_{rs\wedge}\oint_{tu\wedge} F^{(\wedge)}_{rstu}\,\frac{\langle\phi|\gamma_{st}|\phi\rangle}{[st]^{1/2}} \qquad \text{(VI.28)}$$

Passando à matriz de correção lembremos que, de acordo com o que foi dito no final da subseção IV-5.3, ela se anula para os problemas de duas e de quatro partículas ativas, isto é,

$$h^{(\wedge)}_{rstu}(2) = h^{(\wedge)}_{rstu}(4) = 0 \qquad \text{(VI.29)}$$

Já para o problema de seis partículas ativas, cujo estado-pai é (VI.13), partimos de (IV.109-111) e, depois de alguns cálculos que estão feitos no apêndice E, obtemos (*):

$$h^{(\wedge)}_{rstu}(6) = \delta_{rt}\delta_{su}\frac{4}{[rs]}|\mu_{rs}|^2(\varepsilon_r+\varepsilon_s) + \frac{4}{[rstu]^{1/2}}\mu_{rs}\mu^*_{tu}W^{(\wedge)}_{turs} \qquad \text{(VI.30)}$$

(*) Para $r \leq s$ e $t \leq u$.

para $\Lambda \neq 0$ e

$$h^{(0)}_{rrtt}(6) = \sum_a u'_{ra}\, u'^{*}_{ta} \cdot 2\varepsilon_a + \sum_{ac} u'_{ra}\, u'^{*}_{tc}\, W^{(0)}_{cc\,aa} \,, \qquad \text{(VI.31)}$$

com u_{ab} e u'_{ab} definidos conforme (VI.14) e (VI.20) respectivamente.

A matriz de energia pode ser agora obtida de (IV.87):

$$\mathcal{H}^{(\Lambda)}_{rs\,tu} = \mathcal{H}^{(\Lambda-)}_{rs\,tu} - h^{(\Lambda)}_{rs\,tu} \,. \qquad \text{(VI.32)}$$

VI-4) INTERAÇÃO EFETIVA DE KUO E HERLING

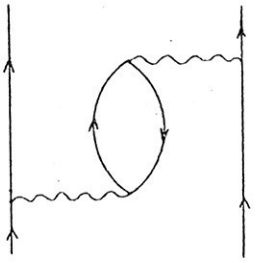
Como em qualquer cálculo ligado ao modelo de camadas, precisamos especificar a interação efetiva, cujos elementos de matriz temos designado por $W^{(\Lambda)}_{ab\,cd}$. Tradicionalmente são usadas interações efetivas fenomenológicas, obtidas por ajuste a dados espectroscópicos criteriosamente escolhidos. Às vezes os próprios elementos de matriz são diretamente determinados (Tal 62). No entanto é mais comum tomar-se para a interação uma forma funcional conveniente, envolvendo tipicamente gaussianas e funções de Yukawa, com certo número de parâmetros livres a determinar. Desse tipo são, por exemplo, as usadas por True e colaboradores para o chumbo (Tru + 58 ; Tru 68 ; Tru + 71, MaT 73). A forma funcional mais simples é sem dúvida a função delta, que aparece em duas das interações efetivas mais

populares atualmente: a interação delta de superfície modificada (MSDI) de Moszkowski (Mos 70) e a interação de Skyrme (VaB 71). Ambas incluem, ainda que esquematicamente, uma dependência na velocidade e na densidade da matéria nuclear, como prevê a teoria.

Todas essas interações conseguem coordenar surpreendentemente bem um grande número de dados experimentais. Em contrapartida, restam a arbitrariedade da sua escolha e a ausência de uma ligação clara com a interação nuclear propriamente dita. Essa não é conhecida; desde a década de 60, porém, têm surgido diversos potenciais fenomenológicos com alguma base teórica, como a de Hamada-Johnston (HaJ 62), capazes de reproduzir propriedades do dêuteron e o espalhamento elástico núcleon-núcleon até energias de 350 MeV. Usados em cálculos de matéria nuclear, os resultados foram razoáveis se bem que quantitativamente inexatos, especialmente no que diz respeito à energia de ligação. Isso levou Kuo e Brown, entre outros, a tentarem, com bastante sucesso, deduzir interações efetivas realísticas a partir desses potenciais usando a teoria de perturbações para muitos corpos (KuB 66). Um ponto de capital importância é que a distâncias inferiores a aproximadamente 0,4 fm esses potenciais são infinitamente (ou quase) repulsivos e não podem, portanto, ser usados diretamente em teoria de perturbações. É necessário substituí-los pela matriz de reação de Brueckner, ou matriz G, que trata o espalhamento de dois núcleons exatamente mantendo os demais inertes.

Uma primeira aproximação para a interação efetiva seria a matriz G; no entanto isso não é suficiente e a razão é que um núcleon pode interagir com outro, indiretamente, pela polarização do caroço formado pelos demais. O meio mais simples

seria uma excitação virtual partícula-buraco conforme o diagrama

G_{3p1h} =  , (VI.33)

onde a linha ondulada representa a matriz G. Como o espaço-modelo em geral não inclui a possibilidade de tais processos, a interação efetiva deve ser correspondentemente renormalizada e, apesar de incertezas quanto ao cálculo de G_{3p1h} e à não inclusão de outros processos também plàusíveis (Kuo 74), resùltados numéricos mostram que a escolha

$$V = G + G_{3p1h} \quad , \qquad \text{(VI.34)}$$

para a interação efetiva, é satisfatória próximo a camadas fechadas em diversas regiões da tabela periódica.

As primeiras interações efetivas realísticas foram obtidas (KuB 66; KuB 68) para núcleos leves, cujos espaços-modelo são mais simples. Encorajados pelos resultados, Kuo e Herling (KHe 71) deduziram por um método análogo e usando o mesmo potencial núcleon-núcleon, o de Hamada-Johnston, uma interação realística para a região do chumbo. Usada em cálculos convencionais de modelo de camadas envolvendo de dois a quatro núcleons ativos (ou buracos de núcleons) e o caroço inerte ^{208}Pb, os resultados foram satisfatórios tanto no que diz respeito aos espectros como às funções de onda (HeK 72; McK 75).

Essa é a interação efetiva que usaremos nas seções seguintes, onde os espaços-modelo serão especificados. Damos abaixo as convenções de Kuo e Herling, que adotaremos neste capítulo:

1º) As funções angulares são os harmônicos esféricos com fases de Condon e Shortley.

2º) O acoplamento spin-órbita é feito na ordem $\vec{\ell} + \vec{s} = \vec{j}$.

3º) As funções radiais são as de oscilador harmônico com as convenções de Moshinsky (BrM 67): O número quântico radial n é igual ao número de nós excetuando a origem e o infinito e o sinal das funções radiais é fixado de modo a fazê-las positivas próximo a origem.

Notemos que essas convenções concordam com as do programa DWUCK (apêndice B), exceto a última. Portanto há que introduzir a correção de sinal $(-)^n$ para cada orbital que aparece nas amplitudes espectroscópicas, antes de usá-las naquele programa.

VI-5) APLICAÇÃO AO ^{210,212,214}Pb

Para esses isótopos adotamos o mesmo espaço-modelo de Kuo e Herling, que mantém inerte o ^{208}Pb e inclui os sete orbitais para nêutrons acima do número mágico 126. As energias de partícula-única, retiradas da experiência, estão indicadas na tabela 1. A correspondente interação efetiva será denominada HK1.

McGrory e Kuo (McK 75) realizaram um cálculo convencional de modelo de camadas para o ^{210,212}Pb usando essencialmente essa interação; porém, como o espaço-modelo do ^{212}Pb resultou muito grande para o programa de computador de que dispunham, foram obrigados a truncá-lo, considerando apenas os cinco orbitais mais baixos. A interação efetiva, que foi renormalizada para compensar esse truncamento, será denominada HK2 no que segue.

Os resultados das equações de movimento com a interação HK1 são comparados com os valores experimentais na tabela 11 e na figura 3. Tanto os espectros de excitação para os estados mais baixos com $J^{\pi} = 2^{+}$, 4^{+} , 6^{+} e 8^{+} no caso do $^{210,212}Pb$ e $J^{\pi} = 2^{+}$ no caso do ^{214}Pb, como as energias dos estados fundamentais, são bem reproduzidos.

Foram também calculadas, com a teoria DWBA explicada no apêndica B e com as amplitudes espectroscópicas dadas pela equação (IV.96), as seções de choque das reações $^{208}Pb(t,p)^{210}Pb$, $^{210}Pb(t,p)^{212}Pb$ e $^{212}Pb(t,p)^{214}Pb$ para esses estados finais. Na tabela 11 e na figura 6 encontram-se as seções de choque relativas para essas reações. A seção de choque relativa para uma da da transição é a razão entre sua seção de choque absoluta e aquela da transição para o estado final de energia mais baixa e com o mesmo valor de J na reação $^{208}Pb(t,p)^{210}Pb$. A concordância dessas seções de choque relativas com a experiência é apenas qualitativa embora seja ligeiramente superior à obtida por McGrory e Kuo. Esses autores sugeriram que a má qualidade de seus resultados pudesse dever-se à importância , para essas transições , dos dois orbitais excluídos dos seus cálculos, pois haviam notado que a sua inclusão (apesar de só participarem em 5% da função de onda) era capaz de duplicar as seções de choque absolutas da reação $^{208}Pb(t,p)^{210}Pb$. No entanto, o fato de os nossos resultados não serem sensivelmente melhores mostra que essa não é a deficiência primordial.

VI-6) APLICAÇÃO AO ^{206,204,202}Pb

O espaço-modelo que adotamos para esses isótopos também coincide com o de Kuo e Herling, mantendo o ^{208}Pb inerte e incluindo os cinco orbitais para buracos de nêutrons abaixo do número mágico 126, com as energias de partícula-única retiradas da experiência (tabela 1).

Nos seus cálculos de modelo de camadas para o ^{206,204}Pb, McGrory e Kuo (McK 75) usaram também esse espaço com a interação de Kuo e Herling, sendo que, como a contribuição do termo de polarização do caroço era excessiva, arbitrariamente a reduziram em 25%. Essa interação será denominada HK3 no que segue.

Nós preferimos alterar a interação efetiva de Kuo e Herling acrescentando a ela um termo de emparelhamento do tipo (V.4) com G=-0,0173 MeV, escolhido de modo a reproduzir a energia de excitação do estado 2_1^+ do ^{206}Pb. A interação resultante será denominada HK4. Ambas as prescrições são "ad hoc", mas argumentaríamos em favor dessa última, pois o defeito da interação original é produzir um estado fundamental do ^{206}Pb excessivamente ligado (KHe 71), o que pode ser corrigido por um termo de emparelhamento sem afetar as energias absolutas dos estados com J≠0. Além disso, Kuo e Brown mencionaram (KuB 67) que certos processos não incluídos em (VI.34) contribuiriam principalmente para a componente de emparelhamento da interação.

Há uma grande quantidade de informações espectroscópicas sobre esses isótopos (Web 79; Sch 79; Sch 78), incluindo diversas determinações de spin e paridade, especialmente depois das investigações experimentais de Lanford (Lan 77) com reacões (p,t). Os espectros são comparados com os resultados das equações de movimento usando a interação HK4, na figura 4. A concor-

dância é em geral boa, exceto para os níveis 4^+, dos quais há três para o ^{204}Pb entre 1 MeV e 2 MeV de excitação, enquanto os cálculos produzem apenas dois. O mesmo ocorre para o ^{202}Pb.

Na figura 5 comparamos os espectros obtidos por McGrory e Kuo (McK 75) para o ^{204}Pb, tanto por um cálculo de modelo de camadas completo (MCA) como por outro em que foram incluídas apenas as configurações com senioridade zero ou dois (SEN. 0+2), com os que obtivemos pelas equações de movimento (EQM) usando, desta vez, exatamente a mesma interação que aqueles autores — HK3. (Esclarecemos que os estados 6^+ não foram calculados em MCA.) A primeira coisa a notar é que, como o EQM, também o SEN. 0+2 produz apenas dois níveis 4^+ entre 1 MeV e 2 MeV de excitação, o próximo só aparecendo a 2,66 MeV. Enquanto isso, no MCA esse nível tem sua energia abaixada para 2,05MeV em muito melhor concordância aom a experiência. Podemos, assim, atribuir a falha no EQM, à qual nos referimos acima, a uma forte contaminação dos estados 4^+ de baixa energia por componentes de senioridade quatro. Na teoria simples de emparelhamento multipolar (ver capítulo I), essas componentes poderiam ser estados de dois fônons quadripolares acoplados a J=4, cuja energia de excitação (2 x 0,80 MeV) estaria nessa faixa.

Do estudo comparativo que fizeram dos cálculos MCA e SEN. 0+2, McGrory e Kuo (McK 75) concluíram que não somente os espectros mas também as funções de onda são bastante semelhantes nos dois casos, especialmente para os estados mais baixos com cada valor do momento angular. A função de onda do estado fundamental do ^{204}Pb, por exemplo, é constituída em mais de 99% por configurações com senioridade nula. Essa é mais uma manifestação da tendência generalizada que têm as interações efetivas nucle

ares de serem aproximadamente diagonais em senioridade e de fazerem corresponder os estados de menor energia aos de menor senioridade (BrG 77; Boh+68). Vemos, na figura 5, que os níveis de energia obtidos pelo cálculo SEN. 0+2 são intermediários entre os dos cálculos MCA e EQM. Isso se entende, notando-se que os operadores de excitação (IV.83) só podem criar estados num subespaço restrito daquele dos estados com senioridade mínima . A discussão acima justifica supormos que sejam desse tipo os estados com enérgia mais baixa para cada valor do momento angular.

Nas tabelas 12, 13 e 14 comparamos as seções de choque relativas observadas (EXP) para as reações ^{208}Pb(p,t)^{206}Pb, ^{206}Pb(p,t)^{204}Pb e ^{204}Pb(p,t)^{202}Pb com as calculadas em DWBA, conforme o apêndice B , sendo as amplitudes espectroscópicas retiradas, conforme (IV.99), do cálculo com as equações de movimento (EQM) com a interação HK4. Para as duas primeiras reações damos também os valores obtidos pelo modelo de camadas completo (MCA) por McGrory e Kuo (McK 75). As seções de choque são, no presente caso, dadas em relação à transição com energia mais baixa, para cada valor de J, na reação ^{208}Pb(p,t)^{206}Pb (ver tabela 12). Para todos os valores de J considerados , a saber, $J^{\pi}=0^{+},2^{+},4^{+}$ e 6^{+}, a transição mais intensa ocorre para o estado de energia mais baixa. Essas são também as melhor reproduzidas, tanto por EQM como por MCA, e grandes discrepâncias só ocorrem para algumas das outras. Se nos limitamos àquelas transições, vemos que a maior discrepância entre o EQM e o MCA ocorre para o estado final 4_1^+ no ^{204}Pb. Isso corrobora as observações feitas alguns parágrafos acima sobre os estados 4^+. Os resultados para as transições mais intensas com cada valor de J , tanto (p,t) como (t,p), estão resumidos na figura 6.

Abaixo de cada espectro nas figuras 3,4 e 5, encontram-se as correspondentes energias dos estados fundamentais em relação à do ^{208}Pb. Na tabela 15 damos a diferença entre as energias dos estados fundamentais calculadas pelo EQM e pelo MCA e os valores experimentais. Vemos que as equações de movimento prevêem muito bem as energias de ligação do ^{210}, ^{212}, ^{214}Pb. Quanto aos isótopos ^{206}, ^{204}, ^{202}Pb, os erros são maiores, mas isso não deve ser atribuído às equações de movimento e sim à interação efetiva, pois o mesmo ocorre com os resultados do cálculo de modelo de camadas de McGrory e Kuo (McK 75) para o ^{206,204}Pb.

CAPÍTULO VII

CONCLUSÕES

O objetivo inicial desta tese era a aplicação das equações de movimento (I.3) de D.J.Rowe (Row 68; Row+75) às excitações nucleares partícula-partícula. Cálculos preliminares com uma hamiltoniana de emparelhamento, não relatados aqui, deram resultados totalmente insatisfatórios. O motivo, conforme explicamos no capítulo I, se prende à violação da condição de aniquilação do estado-pai (a segunda das equações(I.2)), que não pode ser considerado, nem mesmo aproximadamente, o vácuo para excitações partícula-partícula. Por isso derivamos as novas equações de movimento (IV.18, 18') relaxando aquela condição. A diferença entre essas equações e as de Rowe está no aparecimento do termo de correção para a energia $\langle\Phi|\mathcal{O}^{\dagger} H \delta\mathcal{O}|\Phi\rangle$ e no fato de a métrica ser agora dada pelo produto dos operadores de desexitação e exitação e não pelo seu comutador (ou anticomutador) .

As novas equações foram inicialmente aplicadas ao cálculo dos estados com senioridade nula de 2, 4 e 6 partículas sujeitas a uma hamiltoniana de emparelhamento e, pela comparação com a solução exata desse problema, viu-se que os resultados das equações de movimento são exelentes, com os espectros de baixa energia reproduzidos quase que exatamente. Foi realizado um segundo calcúlo excluindo o termo de correção para a energia, o que afetou as amplitudes de excitação ligeiramente e as energias absolutas sensivelmente, sem inutilizar, porém, os resultados. Isso mostra que a inadequação das equações de Rowe (I.3) para as exitações partícula-partícula se deve principalmente à métrica e não ao termo de correção para a energia.

Comparamos, ainda, nossas equações com a teoria MTDA de Goswami e colaboradores (GoN 70; GhG 72) para vibrações de emparelhamento. Vimos que a MTDA viola o princípio de Pauli, o que a torna inadequada para o ^{204}Pb, por exemplo, devido à pequena dimensão e consequente alta ocupação relativa do orbital 2p1/2.

Finalmente, calculamos com nossas equações de movimento e uma hamiltoniana realística alguns estados com paridade natural positiva de isótopos pares do chumbo. Esse cálculo fornece diretamente as amplitudes espectroscópicas para a reação específica de transferência de dois núcleons. Com essas amplitudes espectroscópicas calculamos em DWBA, usando o programa DWUCK, as seções de choque para as reações (t,p) levando ao $^{210, 212, 214}$Pb e para as reações (p,t) levando ao $^{206, 204, 202}$Pb. De modo geral, tanto as energias de excitação como as seções de choque relativas para essas reações são bem reproduzidas, especialmente para as transições mais intensas, que envolvem sempre o estado de energia mais baixa para cada valor de J, exatamente aquele que os operadores de excitação que usamos têm melhores condições de descrever. As discrepâncias que ocorrem não são maiores que as do cálculo convencional de modelo de camadas realizado por McGrory e Kuo (McK 75) para o $^{210, 212, 206, 204}$Pb, usando essencialmente a mesma interação.

Concluímos, assim, que o presente método, não obstante sua simplicidade, consegue, nos casos de interesse, resultados tão bons quanto os de cálculos bem mais sofisticados. Para ver isso melhor basta notar, por exemplo, que, para os estados 0^+ do ^{204}Pb, McGrory e Kuo (McK 75) usaram um espaço-modelo com 113 configurações. Fazendo um truncamento para incluir apenas configurações com senioridade zero e dois, eles

reduziram esse número para 20. Enquanto isso, os operadores de excitação que usamos para descrever esses estados têm apenas 6 componentes. Para estados 4^+ esses números seriam respectivamente 560, 70 e 12. Lembrando como essas dimensões crescem rapidamente com o número de partículas ativas em cálculos de modelo de camadas, não surpreenderia se para o ^{202}Pb fossem necessários um ou dois milhares de configurações. No presente método, entretanto, os operadores de excitação continuam com o mesmo número reduzido de componentes.

Neste trabalho, as equações de movimento para excitações partícula-partícula que propusemos foram testadas apenas para 2, 4 e 6 partículas ativas. No entanto foram dadas expressões genéricas para a matriz principal e métrica, envolvendo as densidades de uma e duas partículas, sendo possível, em princípio, estender os cálculos para um número arbitrário de partículas. A matriz de correção tem uma estrutura um pouco mais complicada mas, como sua contribuição não é muito grande, pode-se pensar em algum esquema aproximado para calculá-la.

Uma limitação das equações que usamos é que com elas só é possível descrever estados dominados por senioridade zero ou dois, já que esta é a senioridade carregada pelos operadores de excitação e os estados-pai têm senioridade nula. Isso causou algum problema para os estados 4^+ do ^{204}Pb (^{202}Pb), que têm componentes importantes com senioridade quatro. Sugerimos que essas componentes consistiam principalmente de duas excitações com $J^{\pi}= 2^+$ acopladas a J=4. Isso poderia ser investigado estendendo ligeiramente as equações de movimento de modo que elas incluíssem dois estados-pai: o estado fundamental e o estado 2_1^+ do ^{206}Pb (^{204}Pb). Os estados 4^+ seriam então descritos por um

operador de excitação com $J^{\pi} = 4^{+}$ agindo no primeiro estado - pai e outro com $J^{\pi} = 2^{+}$ agindo no segundo.

Há muitas outras possibilidades de estender as equações de movimento aqui propostas. Assim, poderíamos achar mais razoável descrever o sistema de A núcleons não apenas em termos do sistema com A-2 núcleons mas também, ao mesmo tempo, em termos do sistema com A+2 núcleons. Bastaria, novamente, considerar dois estados-pai, neste caso os estados fundamentais dos sistemas com A±2 núcleons.

Outra extensão importante seria no sentido de incluir o efeito das correlações partícula-buraco no estado-pai, transformando nosso tratamento, que é do tipo TDA, num tratamento do tipo RPA. Para isso teríamos apenas que incluir na expansão dos operadores de excitação tanto os orbitais para partículas como os orbitais para buracos. Para o ^{206,210}Pb isso seria semelhante ao 2NRPA de Vary e Ginocchio (VaG 71), com a diferença que não faríamos nenhuma aproximação de bosons.

Finalmente queremos enfatizar que, apesar de termos aplicado as equações de movimento apenas no caso, mais simples, em que o estado-pai tem ordem tensorial nula, demos também a forma das equações no caso mais geral, sendo possível obtê-las em detalhe, usando as técnicas tensoriais apresentadas nos capítulos II e III. Poderíamos, então, usá-las também para núcleos ímpar-ímpar, nos quais $J^{\pi} \neq 0^{+}$, ou ainda para núcleos leves e médio-pesados, para os quais seria necessário incluir o isospin.

Há, portanto, uma vasta gama para novas aplicações e extensões das equações de movimento para excitações partícula-partícula que foram aqui desenvolvidas.

APÊNDICE A

AUTOVALORES RELATIVOS

A-1) INTRODUÇÃO

Na seção IV-3 a equação de movimento foi reduzida ao sistema linear homogêneo (IV.30,30') que reproduzimos abaixo:

$$\sum_{j=1}^{n} \mathcal{H}_{j'j}\, x_j = E \sum_{j=1}^{n} \mathcal{M}_{j'j}\, x_j \qquad (A.1)$$

para j' = 1,2,...,n, com

$$\sum_{j',j=1}^{n} x_{j'}^{*}\, \mathcal{M}_{j'j}\, x_j \neq 0 \quad , \qquad (A.1')$$

onde $\mathcal{H}_{j'j}$ e $\mathcal{M}_{j'j}$ são as matrizes hermitianas definidas em (IV.28) e (IV.27) respectivamente. Neste apêndice nos propomos a estudar as propriedades desse sistema de equações.

Para isso é conveniente reescrevê-lo em termos de operadores lineares. Introduzimos o espaço vetorial complexo de n dimensões $\mathbb{C}_n$, cujos vetores denotaremos por letras sublinhadas por um til. Assim

$$\underset{\sim}{x} = (x_1, x_2, \ldots x_n) \in \mathbb{C}_n \quad , \qquad (A.2)$$

onde x_1, x_2,...x_n são números complexos quaisquer.

Definimos o produto escalar de dois vetores de $\mathbb{C}_n$ do modo usual:

$$(\underset{\sim}{y}, \underset{\sim}{x}) = \sum_{j=1}^{n} y_j^{*} x_j \quad . \qquad (A.3)$$

Os estados de um sistema quântico são representados por vetores $|\psi\rangle$ de um espaço de Hilbert $\mathbb{H}$:

$$|\psi\rangle \in \mathbb{H} \quad . \tag{A.4}$$

Se escolhemos um vetor particular $|\phi\rangle$ (estado-pai) e introduzimos uma base de operadores de $\mathbb{H}$

$$\{\eta_j^\dagger \; ; \; j = 1, 2, \ldots n\} \quad , \tag{A.5}$$

podemos, dado qualquer vetor $\underset{\sim}{x}$ de $\mathbb{C}_n$, construir o operador

$$\mathcal{O}^\dagger(\underset{\sim}{x}) = \sum_{j=1}^{n} x_j \, \eta_j^\dagger \tag{A.6}$$

e obter o seguinte vetor de $\mathbb{H}$

$$|\psi(\underset{\sim}{x})\rangle = \mathcal{O}^\dagger(\underset{\sim}{x})\,|\phi\rangle \quad . \tag{A.7}$$

Como essa correspondência é linear, fica estabelecido um homomorfismo entre $\mathbb{C}_n$ e $\mathbb{H}$:

$$\begin{aligned} \mathbb{C}_n &\longrightarrow \mathbb{H} \\ \underset{\sim}{x} &\longmapsto |\psi(\underset{\sim}{x})\rangle \quad . \end{aligned} \tag{A.8}$$

Isso é precisamente o que foi feito, em linguagem um pouco diferente, na seção IV-3(*).

Vejamos como se transforma o produto escalar pelo homomorfismo acima. Temos

$$\begin{aligned} \langle\psi(\underset{\sim}{y})\,|\,\psi(\underset{\sim}{x})\rangle &= \sum_{j',j=1}^{n} y_{j'}^{*} \langle\phi|\eta_{j'}\,\eta_j^\dagger|\phi\rangle\, x_j \\ &= \sum_{j',j=1}^{n} y_{j'}^{*}\, \mathcal{M}_{j'j}\, x_j \quad , \end{aligned} \tag{A.9}$$

(*) Consideramos neste apêndice apenas bases finitas, o que é suficiente para os cálculos feitos neste trabalho e é a praxe em Física Nuclear. Espera-se, no entanto, que os resultados a seguir sejam generalizáveis para bases infinitas e, por isso, essa questão permaneceu propositadamente vaga no texto do capítulo IV.

onde usamos a definição (IV.27) da matriz métrica $\mathcal{M}_{j'j}$. Como é sabido, dada uma matriz qualquer $\mathcal{R}_{j'j}$ é possível associar-lhe, univocamente, um operador $\mathcal{R}$ (que será hermitiano se a matriz o for) pela igualdade:

$$(\underset{\sim}{y}, \mathcal{R}\,\underset{\sim}{x}) = \sum_{j',j=1}^{n} y_{j'}^{*}\,\mathcal{R}_{j'j}\,x_j \tag{A.10}$$

para $\underset{\sim}{y}$ e $\underset{\sim}{x}$ quaisquer. Assim, associamos à matriz $\mathcal{M}_{j'j}$ o operador $\mathcal{M}$ e reescrevemos (A.9) na forma

$$\langle \psi(\underset{\sim}{y}) \mid \psi(\underset{\sim}{x}) \rangle = (\underset{\sim}{y}, \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}) \quad . \tag{A.11}$$

É também interessante saber qual a correspondência existente entre os operadores de $\mathbb{H}$ e os de $\mathbb{C}_n$. Seja H um operador qualquer de $\mathbb{H}$; então

$$\begin{aligned} \langle \psi(\underset{\sim}{y}) \mid H \mid \psi(\underset{\sim}{x}) \rangle &= \sum_{j',j=1}^{n} y_{j'}^{*} \langle \phi \mid \eta_{j'} H \eta_j^{\dagger} \mid \phi \rangle x_j \\ &= \sum_{j',j=1}^{n} y_{j'}^{*}\,\mathcal{H}_{j'j}\,x_j \quad , \end{aligned} \tag{A.12}$$

onde definimos a matriz

$$\mathcal{H}_{j'j} = \langle \phi \mid \eta_{j'}^{\dagger} H\, \eta_j \mid \phi \rangle \quad , \tag{A.13}$$

que será hermitiana se H o for. Associando a esta matriz o operador $\mathcal{H}$ conforme a relação (A.10), podemos reescrever (A.12) na forma

$$\langle \psi(\underset{\sim}{y}) \mid H \mid \psi(\underset{\sim}{x}) \rangle = (\underset{\sim}{y}, \mathcal{H}\,\underset{\sim}{x}) \quad . \tag{A.14}$$

Comparando as equações (A.13) e (IV.28), vemos que se H for a hamiltoniana modificada (IV.14), então $\mathcal{H}_{j'j}$, dada por (A.13), será a matriz de energia que aparece no sistema (IV.30,30') reproduzido em (A.1,1'). Podemos, portanto, substituir este sistema pela equação equivalente:

$$\mathcal{H}\,\underset{\sim}{x} = E\,\mathcal{M}\,\underset{\sim}{x} \qquad \text{(A.15)}$$

com

$$(\underset{\sim}{x}, \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}) \neq 0 \quad . \qquad \text{(A.15')}$$

Essa é a equação que estudaremos aqui. Trata-se de um problema de <u>autovalores relativos</u>: os valores de E para os quais existe uma solução de (A.15) satisfazendo (A.15') são chamados <u>autovalores de $\mathcal{H}$ em relação a $\mathcal{M}$</u>. Se $\mathcal{M}$ é o operador unidade, falamos simplesmente nos autovalores e autovetores de $\mathcal{H}$.

Iremos considerar o problema de autovalores relativos apenas para operadores hermitianos. Além disso $\mathcal{H}$ e $\mathcal{M}$ satisfazem certas condições adicionais que explicitaremos na seção A-2. Em A-3 estudaremos um caso particular importante, ficando o mais geral para a seção A-4.

A-2) OPERADORES POSITIVOS, POSITIVOS-DEFINIDOS E COMPATÍVEIS

Comecemos com algumas definições:

DEFINIÇÃO 1 - Um operador hermitiano $\mathcal{M}$ diz-se <u>positivo</u> se $(\underset{\sim}{x}, \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}) \geq 0$ para qualquer vetor $\underset{\sim}{x}$.

DEFINIÇÃO 2 - Um operador positivo $\mathcal{M}$ diz-se <u>positivo-definido</u> se $(\underset{\sim}{x}, \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}) = 0$ implica que $\underset{\sim}{x} = 0$.

DEFINIÇÃO 3 - Um operador hermitiano $\mathcal{H}$ diz-se <u>compatível</u> com o operador hermitiano $\mathcal{M}$ se $\mathcal{M}\,\underset{\sim}{x} = 0$ implica que $\mathcal{H}\,\underset{\sim}{x} = 0$.

Definições análogas podem ser dadas para <u>matrizes positivas</u>, <u>positivas-definidas</u> e <u>compatíveis</u>.

Se $\mathcal{M}$ é um operador positivo seus autovalores $m_1, m_2, \ldots m_n$ (alguns dos quais podem ser repetidos) são números não-ne

gativos e os autovetores correspondentes $\underset{\sim}{m}^{(1)}, \underset{\sim}{m}^{(2)}, \ldots \underset{\sim}{m}^{(n)}$ podem ser escolhidos de modo a formarem uma base ortonormal completa (pois $\mathcal{M}$ é necessariamente hermitiano).

Qualquer vetor $\underset{\sim}{x}$ de $\mathbb{C}_n$ pode ser escrito como

$$\underset{\sim}{x} = \sum_{k=1}^{n} (\underset{\sim}{m}^{(k)}, \underset{\sim}{x})\, \underset{\sim}{m}^{(k)} \tag{A.16}$$

e podemos definir o operador $\mathcal{M}^{1/2}$ tal que

$$\mathcal{M}^{1/2} \underset{\sim}{x} = \sum_{k=1}^{n} \sqrt{m_k}\, (\underset{\sim}{m}^{(k)}, \underset{\sim}{x})\, \underset{\sim}{m}^{(k)} \tag{A.17}$$

Ele é também positivo e satisfaz

$$\mathcal{M} = \mathcal{M}^{1/2} \mathcal{M}^{1/2} , \tag{A.18}$$

justificando a notação.

Os autovalores de $\mathcal{M}^{1/2}$ são os números $\sqrt{m_1}$, $\sqrt{m_2}$, ... $\sqrt{m_n}$ (com possíveis repetições), nenhum dos quais será nulo se $\mathcal{M}$ for positivo-definido. Neste caso, portanto, $\mathcal{M}^{1/2}$ terá um inverso, que denotaremos por $\mathcal{M}^{-1/2}$, satisfazendo

$$\mathcal{M}^{-1/2} \mathcal{M}^{1/2} = 1 . \tag{A.19}$$

Mostremos agora que o operador $\mathcal{M}$ em (A.11) é positivo: Para $\underset{\sim}{y}$ igual a $\underset{\sim}{x}$ temos

$$\langle \psi(\underset{\sim}{x}) \mid \psi(\underset{\sim}{x}) \rangle = (\underset{\sim}{x}, \mathcal{M}\, \underset{\sim}{x}) \tag{A.20}$$

e notando que o primeiro membro é o quadrado da norma de um vetor, podemos escrever

$$(\underset{\sim}{x}, \mathcal{M}\, \underset{\sim}{x}) \geq 0 \tag{A.21}$$

para qualquer $\underset{\sim}{x}$, satisfazendo a definição 1.

Em geral não podemos garantir que $\mathcal{M}$ seja positivo-de-

finido, porém decorre de (A.20) que

$$\mathcal{M}\,\underset{\sim}{x} = 0 \tag{A.22}$$

implica que

$$|\psi(\underset{\sim}{x})\rangle = 0 \ . \tag{A.23}$$

Esse resultado, introduzido em (A.14), dá lugar à igualdade

$$(\underset{\sim}{y}, \mathcal{H}\,\underset{\sim}{x}) = 0 \tag{A.24}$$

para qualquer $\underset{\sim}{y}$; ou seja,

$$\mathcal{H}\,\underset{\sim}{x} = 0 \ . \tag{A.25}$$

Isso mostra que o operador hermitiano $\mathcal{H}$ definido em (A.14) é compatível com $\mathcal{M}$.

A-3) AUTOVALORES EM RELAÇÃO A UM OPERADOR POSITIVO-DEFINIDO

Consideramos aqui a equação (A.15,15') no caso particular em que $\mathcal{M}$ é positivo-definido e, portanto, existem os operadores $\mathcal{M}^{1/2}$ e $\mathcal{M}^{-1/2}$, como vimos na seção anterior. Introduzindo (A.18) na equação (A.15), multiplicando-a por $\mathcal{M}^{-1/2}$, usando (A.19) e mudando a variável para

$$\underset{\sim}{z} = \mathcal{M}^{1/2}\,\underset{\sim}{x} \ , \tag{A.26}$$

obtemos a equação equivalente

$$(\mathcal{M}^{-1/2}\,\mathcal{H}\,\mathcal{M}^{-1/2})\,\underset{\sim}{z} = E\,\underset{\sim}{z} \ , \tag{A.27}$$

onde $\mathcal{M}^{-1/2}\,\mathcal{H}\,\mathcal{M}^{-1/2}$ é um operador hermitiano, já que $\mathcal{H}$ e $\mathcal{M}^{-1/2}$ o são.

Transformamos assim (A.15,15') no bem conhecido problema de autovalores para um operador hermitiano: Eles são todos reais e denotamo-os por E_i com i = 1,2,...n, havendo repetições se houver degenerescência. Os autovetores correspondentes, $\underset{\sim}{z}^{(i)}$ com i = 1,2,...n, podem ser escolhidos de modo a formarem uma base ortonormal completa, isto é,

$$(\underset{\sim}{z}^{(i')}, \underset{\sim}{z}^{(i)}) = \delta_{i'i} \qquad \text{(A.28)}$$

com i',i = 1,2,...n.

Os autovalores de $\mathcal{H}$ em relação a $\mathcal{M}$ são os próprios E_i acima definidos e os autovetores de $\mathcal{H}$ em relação a $\mathcal{M}$ podem ser obtidos de (A.26), tendo-se

$$\underset{\sim}{x}^{(i)} = \mathcal{M}^{-1/2}\, \underset{\sim}{z}^{(i)} \qquad \text{(A.29)}$$

De (A.28) decorrem as relações

$$(\underset{\sim}{x}^{(i')}, \mathcal{M}\, \underset{\sim}{x}^{(i)}) = \delta_{i'i} \qquad \text{(A.30)}$$

para i',i = 1,2,...n. Em particular, vê-se que a condição (A.15') é satisfeita.

A-4) AUTOVALORES EM RELAÇÃO A UM OPERADOR POSITIVO

Consideremos aqui, finalmente, a equação (A.15,15') no caso mais geral que nos interessa, ou seja, com $\mathcal{H}$ hermitiano, $\mathcal{M}$ positivo e $\mathcal{H}$ compatível com $\mathcal{M}$.

Sejam $\mathcal{L}$ o projetor ortogonal sobre o espaço nulo de $\mathcal{M}$, isto é, sobre o sub-espaço formado por todas as soluções de

$$\mathcal{M}\, \underset{\sim}{Y} = 0 \,, \qquad \text{(A.31)}$$

e $\mathcal{P}$ o projetor ortogonal sobre o sub-espaço complementar a esse, que denotaremos por $\mathcal{P}\mathbb{C}_n$. Temos

$$\mathcal{P} + \mathcal{Q} = 1 \tag{A.32}$$

e

$$\mathcal{M}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{M} = 0 \quad . \tag{A.33}$$

Sendo $\mathcal{H}$ compatível com $\mathcal{M}$, para qualquer $\underset{\sim}{Y}$ satisfazendo (A.31) temos também

$$\mathcal{H}\underset{\sim}{Y} = 0 \quad , \tag{A.34}$$

o que permite escrever

$$\mathcal{H}\mathcal{Q} = \mathcal{Q}\mathcal{H} = 0 \quad . \tag{A.35}$$

Das equações (A.32), (A.33) e (A.35) decorrem

$$\mathcal{M} = \mathcal{P}\mathcal{M}\mathcal{P} \tag{A.36}$$

e

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P} \quad . \tag{A.37}$$

Qualquer vetor $\underset{\sim}{x}$ de $\mathbb{C}_n$ pode ser escrito na forma

$$\underset{\sim}{x} = \underset{\sim}{X} + \underset{\sim}{Y} \tag{A.38}$$

com

$$\underset{\sim}{X} = \mathcal{P}\underset{\sim}{x} \tag{A.39}$$

e

$$\underset{\sim}{Y} = \mathcal{Q}\underset{\sim}{x} \quad . \tag{A.40}$$

O vetor Y satisfaz (A.31) e (A.34); portanto a equação (A.15) pode ser substituída por

$$\mathcal{H}\,\underset{\sim}{X} = E\,\mathcal{M}\,\underset{\sim}{X} \quad , \tag{A.41}$$

ou ainda, em vista de (A.36) e (A.37),

$$(\mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P})\,\underset{\sim}{X} = E\,(\mathcal{P}\mathcal{M}\mathcal{P})\,\underset{\sim}{X} \quad . \tag{A.42}$$

Analogamente podemos substituir a condição (A.15') por

$$(\underset{\sim}{X}\,,\ \mathcal{P}\mathcal{M}\mathcal{P}\,\underset{\sim}{X}) \neq 0 \quad . \tag{A.42'}$$

A equação (A.42) e a condição (A.42') restringem-se ao subespaço $\mathcal{P}\mathbb{C}_m$ e nele o operador $\mathcal{P}\mathcal{M}\mathcal{P}$ é positivo-definido. Portanto, valem os resultados da seção anterior e concluímos o seguinte:

Seja p o posto do operador $\mathcal{M}$, isto é, a dimensão do subespaço $\mathcal{P}\mathbb{C}_m$. Os autovalores de $\mathcal{H}$ em relação a $\mathcal{M}$ são os valores de E para os quais (A.42) tem solução não trivial. Eles são todos reais e denotamo-os por E_i com i = 1,2,...p, podendo haver repetições (autovalores degenerados).

As soluções correspondentes de (A.42), $\underset{\sim}{X}^{(i)}$ com i = 1,2,...p, podem ser escolhidas de modo a satisfazerem

$$(\underset{\sim}{X}^{(i')}\,,\ \mathcal{P}\mathcal{M}\mathcal{P}\,\underset{\sim}{X}^{(i)}) = \delta_{i'i} \tag{A.43}$$

para i',i = 1,2,...p. Com elas podemos construir os autovetores de $\mathcal{H}$ em relação a $\mathcal{M}$, usando a equação (A.38). São eles

$$\underset{\sim}{x}^{(i)} = \underset{\sim}{X}^{(i)} + \underset{\sim}{Y}^{(i)} \tag{A.44}$$

com i = 1,2,...p, onde os $\underset{\sim}{Y}^{(i)}$ são soluções arbitrárias de (A.31). É fácil verificar que

$$(\underset{\sim}{x}^{(i')}, \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}^{(i)}) = (\underset{\sim}{X}^{(i')}, \mathcal{P}\mathcal{M}\mathcal{P}\,\underset{\sim}{X}^{(i)}) \quad , \tag{A.45}$$

portanto

$$(\underset{\sim}{x}^{(i')}, \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}^{(i)}) = \delta_{i'i} \tag{A.46}$$

com i', i= =,2,...p.

Apesar da arbitrariedade em (A.44) os vetores

$$\underset{\sim}{s}^{(i)} = \mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}^{(i)} \tag{A.47}$$

com i = 1,2,...p são unívocos a menos de uma fase. Com efeito, eles são sempre iguais a $\mathcal{M}\,\underset{\sim}{x}^{(i)}$, independentemente da escolha dos $\underset{\sim}{Y}^{(i)}$.

APÊNDICE B

REAÇÕES DE TRANSFERÊNCIA DE DOIS NÚCLEONS

B-1) INTRODUÇÃO

As reações nucleares diretas são instrumentos dos mais úteis para a obtenção de informações sobre estrutura nuclear. Se descrevemos os estados nucleares por meio de diferentes tipos de excitações simples, a cada um deles corresponde, por assim dizer, uma reação direta específica. Para excitações partícula-partícula as reações específicas são as de transferência de dois núcleons.

A seção de choque para uma reação direta pode, em geral, ser escrita como o módulo quadrado da soma de alguns termos, cada um dos quais é o produto de um coeficiente denominado amplitude espectroscópica, que indica a importância e a coerência das contribuições de cada uma das configurações possíveis no estado final, e uma função dos ângulos de espalhamento determinada essencialmente pelo momento angular transferido na reação. Desse modo, a distribuição angular dos produtos da reação permite determinar os valores possíveis para o momento angular do estado final, enquanto a intensidade da transição fornece informações específicas sobre estrutura nuclear. Uma dada teoria de estrutura nuclear pode, então, ser testada através das amplitudes espectroscópicas que ela fornece.

Uma das teorias mais simples para o cálculo das seções de choque é a aproximação de ondas distorcidas de Born (DWBA) que apresentamos brevemente na seção B-2. Em cálculos desse tipo são necessários potenciais óticos para o projétil e para a

partícula ejetada. Como estaremos interessados, no capítulo VI, em reações (p,t) e (t,p) apresentamos, na seção B-3 , o potencial ótico que usaremos para o próton e, na seção B-4, o que será usado para o ^{3}H.

B-2) TEORIA DWBA

Apresentamos aqui uma revisão extremamente sumária e simplificada da teoria DWBA para reações de transferência de dois núcleons, com o intuito apenas de introduzir as expressões explícitas para as amplitudes espectroscópicas, únicas grandezas de interesse do ponto de vista da estrutura nuclear. Para fixar as idéias nos limitamos às reações (p,t), nas quais estaremos particularmente interessados no capítulo VI. Seguimos a exposição de (Bae+73).

Na teoria DWBA, a matriz de transição (matriz T) para a reação A(p,t)B escreve-se

$$T_{fi} = \sqrt{3}\sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} \int d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\, d\vec{r}_3\, d\vec{\xi}_B \Big\{ \chi_t^{(-)*}\Big(\frac{\vec{r}_1+\vec{r}_2+\vec{r}_3}{3} - \vec{r}_B\Big)$$

$$\Phi_x^*(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{r}_3)\, \psi_{B\,\hat{\Gamma}_B}^{\Gamma_B\,*}(\vec{\xi}_B)\,\big[V(\vec{r}_3-\vec{r}_1) + V(\vec{r}_3-\vec{r}_2)\big] \qquad \text{(B-1)}$$

$$\psi_{A\,\hat{\Gamma}_A}^{\Gamma_A}(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\vec{\xi}_B)\;\chi_p^{(+)}(\vec{r}_3-\vec{r}_A)\Big\}\;,$$

onde $\chi_p^{(+)}$ e $\chi_t^{(-)}$ são as funções de onda distorcidas do próton e do ^{3}H, $\psi_A^{\Gamma_A}$ e $\psi_B^{\Gamma_B}$ são as funções de onda dos núcleos A e B nos devidos estados, e n é o número de núcleons ativos no alvo.

Depois de diversas aproximações, envolvendo um alcance nulo para a interação entre o próton e o di-nêutron transferido além de uma função de onda gaussiana para o ^{3}H, obtém-se

$$T_{fi} = (\text{constante de normalização}) \times \int d\vec{r}_3 \; \chi_t^{(-)*}(\vec{r}_3)$$

$$\left\{ \int d\vec{r}_1 \, d\vec{r}_2 \; \phi_t^{(gauss.)*}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) \; \delta\left(\vec{r}_3 - \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \right. \tag{B-2}$$

$$\left. \sum_{rs:\Gamma} C^{\Gamma_B \; \Gamma \; \Gamma_A}_{\hat{\Gamma}_B \; \hat{\Gamma} \; \hat{\Gamma}_A} \; S(rs\Gamma) \; \psi^{\Gamma}_{rs}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \right\} \chi_p^{(+)}\left(\frac{B}{A}\vec{r}_3\right) \; ,$$

onde S(rsΓ) é a amplitude espectroscópica, dada por

$$S(rs\Gamma) = \sqrt{\frac{n(n-1)}{2}} \left\langle \psi_A^{\Gamma_A}(1,2,\ldots n) \middle| \left(\psi_B^{\Gamma_B}(1,2,\ldots n-2) \, \psi^{\Gamma}_{rs}(n-1,n) \right)^{\Gamma_A} \right\rangle \; . \tag{B-3}$$

Usando os resultados da seção III-2, especialmente a equação (III.26), escrevemos equivalentemente

$$S(rs\Gamma) = [\Gamma_A]^{-1/2} \left(\bar{\psi}_B^{\Gamma_B} \, \mathcal{Z}^{\Gamma}_{rs} \, \psi_A^{\Gamma_A} \right)^0 \; , \tag{B-4}$$

onde $\mathcal{Z}^{\Gamma}_{rs}$ é o operador de estado (III.21), correspondendo à função de onda $\psi^{\Gamma}_{rs}(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$ para dois nêutrons. Nesta forma (B-4) é também a amplitude espectroscópica para a reação B(t,p)A. Às vezes é também conveniente escrever a amplitude espectroscópica em termos de operadores de estado para buracos. A transformação partícula-buraco dá

$$\mathcal{Z}^{\Gamma}_{rs}(\text{buracos}) = - \mathcal{Z}^{\Gamma}_{rs} \tag{B-5}$$

e a equação (B-4) fica

$$S(rs\Gamma) = -[\Gamma_A]^{-1/2} \left(\bar{\psi}_B^{\Gamma_B} \, \mathcal{Z}^{\Gamma}_{rs}(\text{buracos}) \, \psi_A^{\Gamma_A} \right)^0 \; . \tag{B-6}$$

De posse das amplitudes espectroscópicas, a matriz T é calculada pela equação (B-2) e através dela, a seção de choque diferencial correspondente. Existem diversos programas de computador para realizar esta tarefa e para os cálculos do capí-

tulo VI escolhemos o programa DWUCK de autoria de P.D.Kunz.

B-3) POTENCIAL ÓTICO PARA PRÓTONS

Dentre os muitos potenciais óticos existentes para prótons escolhemos o de Becchetti e Greenlees (BeG 69), que tem a vantagem de ser o mesmo escolhido pelos autores com os quais queremos comparar nossos resultados. Damos abaixo os valores (energias em MeV e distâncias em fermi) para a parte real (V_R), spin-órbita (V_{SO}) e imaginária de volume (W_V) e de superfície (W_{SF}) do potencial ótico, onde os alcances são de notados por r e as difusividades por a, E é a energia de bombardeamento, A é o número de massa, Z é o número atômico e N = A-Z:

$$V_R = 54,0 - 0,32\,E + 0,4\cdot Z/A^{1/3} + 24,0\,(N-Z)/A$$

$$r_R = 1,17 \qquad a_R = 0,75$$

$$V_{SO} = 6,2$$

$$r_{SO} = 1,01 \qquad a_{SO} = 0,75$$

(B-7)

$$W_V = 0,22\,E - 2,7 \quad \text{ou zero} \quad (\geq 0)$$

$$W_{SF} = 11,8 - 0,25\,E + 12,0(N-Z)/A \quad \text{ou zero} \quad (\geq 0)$$

$$r_I = 1,32 \qquad a_I = 0,51 + 0,7\,(N-Z)/A$$

O raio coulombiano é dado por

$$R_c = r_c\,A^{1/3} \qquad \text{com} \qquad r_c = 1,185 \ fm\,. \qquad \text{(B-8)}$$

B-4) POTENCIAL ÓTICO PARA O ^3H

Aqui também fazemos a mesma escolha que os autores com os quais queremos comparar os resultados. Trata-se do potencial para o ^3H obtido por Flynn e colaboradores (Fly+69). Para o raio coulombiano tomamos, seguindo esses autores,

$$R_c = r_c A^{1/3} \quad \text{com} \quad r_c = 1,25 \ fm \ . \tag{B-9}$$

O potencial consta apenas de uma parte real (V) e uma parte imaginária (W) cujos valores, com as mesmas notações e unidades da seção B-3, são:

$$\begin{aligned} V &= 166,7 \\ r_R &= 1,16 \qquad a_R = 0,752 \\ W &= 37,5 - 127,4(N-Z)/A \qquad (\geq 0) \\ r_I &= 1,498 \qquad a_I = 0,817 \end{aligned} \tag{B-10}$$

APÊNDICE C

ESTADOS COM SENIORIDADE NULA

C-1) INTRODUÇÃO

O conceito de senioridade, introduzido na Física Atômica em 1942 por Racah, tem desempenhado um papel importante na Física Nuclear desde o advento do modelo de camadas na década seguinte. Definimos um estado com senioridade nula (v=0) como sendo formado exclusivamente de pares de núcleons idênticos acoplados a momento angular zero; mais presisamente, uma combinação linear de componentes do tipo

$$Z_a^{n_a} Z_b^{n_b} \ldots Z_f^{n_f} | \rangle ,$$

onde os expoentes n_a, n_b, ... n_f são iguais aos números de pares nos orbitais a, b, ... f e $| \rangle$ é o vácuo. Se $| v=0 \rangle$ é um estado com senioridade nula e α é um momento angular diferente de zero,

$$Z_{ab}^{\alpha} | v=0 \rangle ,$$

ou qualquer combinação linear de tais estados, tem senioridade dois. De um modo geral, a senioridade de um estado é igual ao número de partículas que não estão, duas a duas, acopladas a momento angular zero, sendo que estados com senioridades distintas devem ser ortogonais.

Nos capítulos V e VI lidamos extensamente com estados com senioridade nula e, por isso, algumas de suas propriedades são demonstradas na seção C-2, enquanto, na seção C-3 ,

obtemos a forma geral da densidade de duas partículas nesses estados.

C-2) PROPRIEDADES ÚTEIS

Observando os comutadores

$$\left[(A^a B^b)^\wedge, (A^c A^c)^0\right]^\wedge = \frac{2}{[c]^{1/2}}\,\delta_{bc}\,(A^a A^b)^\wedge \tag{C.1}$$

e

$$\left[(B^a B^b)^\wedge, (A^c A^c)^0\right]^\wedge = -2\,\delta_{ac}\delta_{bc}\delta_{\wedge 0} + \frac{2}{[c]^{1/2}}\,\delta_{ab\wedge}\,\delta_{ac}\,(A^a B^b)^\wedge , \tag{C.2}$$

obtidos respectivamente de (III.104) e (III.106), usando-se (III.121), vemos que eles se escrevem mais simplesmente em termos dos operadores

$$P_c = -\frac{[c]^{1/2}}{2}(A^c A^c)^0 = \sqrt{\Omega_c}\, Z_c \ , \tag{C.3}$$

$$U^\alpha_{ab} = (A^a B^b)^\alpha \qquad (\alpha \neq 0) \tag{C.4}$$

e

$$T^\alpha_{ab} = -(A^a A^b)^\alpha = \frac{1}{\ell_{ab}}\, Z^\alpha_{ab} \qquad (\alpha \neq 0) \ . \tag{C.5}$$

Com efeito,

$$\left[\bar{P}_a, P_c\right] = \delta_{ac}\,(\Omega_c - N_c) \tag{C.6}$$

$$\left[U^\alpha_{ab}, P_c\right] = \delta_{bc}\, T^\alpha_{ab} \tag{C.7}$$

$$[\bar{T}^{\alpha}_{ab}, P_c] = -\oint_{ab\alpha} \delta_{ac} U^{\alpha}_{ab} \quad . \tag{C.8}$$

Baseados nessas relações, vamos demonstrar algumas proprieda - des para estados dos tipos:

$$|n_a\rangle = P_a^{n_a} |0_a\rangle \quad , \tag{C.9}$$

$$|n_a n_b\rangle = P_a^{n_a} P_b^{n_b} |0_{ab}\rangle \tag{C.10}$$

etc., com os quais podemos, em particular, construir qualquer estado com senioridade nula. Nas equações acima, $|0_a\rangle$, $|0_{ab}\rangle$ etc. denotam estados com os orbitais a, a e b etc. desocupados. No restante da seção, α representa sempre um momento angular não-nulo.

Omitindo provisoriamente o índice do orbital e usando a equação (C.6) e a álgebra de comutadores, obtemos

$$[\bar{P}, P^n] = \sum_{k=1}^{n} P^{n-k} (\Omega - N) P^k \quad ; \tag{C.11}$$

logo

$$[\bar{P}, P^n] |0\rangle = n(\Omega - n + 1) P^{n-1} |0\rangle \tag{C.12}$$

e

$$\bar{P}\,|n\rangle = n(\Omega - n + 1)\,|n-1\rangle \quad . \tag{C.13}$$

Decorre, ainda, de (C.12) e (C.9) que

$$\langle n\,|\,n\rangle = n(\Omega - n + 1)\,\langle n-1\,|\,n-1\rangle \tag{C.14}$$

e, iterando-se essa relação,

$$\langle n\,|\,n\rangle = (n!)^2 \binom{\Omega}{n} \langle 0\,|\,0\rangle \quad , \tag{C.15}$$

onde

$$\binom{\Omega}{n} = \frac{\Omega!}{n!\,(\Omega-n)!} \, . \tag{C.16}$$

é o coeficiente binominal.

Continuando, partimos da identidade

$$U^{\alpha}_{ab}\,|n_b\rangle = [U^{\alpha}_{ab}, P_b]\,|n_b - 1\rangle + P_b\,U^{\alpha}_{ab}\,|n_b - 1\rangle \tag{C.17}$$

e, de acordo com (C.7), escrevemos

$$U^{\alpha}_{ab}\,|n_b\rangle = T^{\alpha}_{ab}\,|n_b - 1\rangle + P_b\,U^{\alpha}_{ab}\,|n_b - 1\rangle \quad , \tag{C.18}$$

podendo-se, agora, mostrar por indução que

$$U^{\alpha}_{ab}\,|n_b\rangle = n_b\,T^{\alpha}_{ab}\,|n_b - 1\rangle \quad . \tag{C.19}$$

Por outro lado, limitando-nos por enquanto ao caso em que a ≠ b, temos, em vista de (C.8),

$$\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a\, n_b\rangle = P_a\,\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a-1,\, n_b\rangle + [\overline{T}^{\alpha}_{ab},\, P_a]\,|n_a-1,\, n_b\rangle$$

$$= P_a\,\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a-1,\, n_b\rangle - U^{\alpha}_{ab}\,|n_a-1,\, n_b\rangle \qquad \text{(C.20)}$$

e, pelo resultado (C.19),

$$\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a\, n_b\rangle = P_a\,\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a-1,\, n_b\rangle - n_b\,\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a-1,\, n_b-1\rangle \qquad \text{(C.21)}$$

Por indução com respeito a n_a demonstra-se, então, que

$$\overline{T}^{\alpha}_{ab}\,|n_a\, n_b\rangle = -n_a\, n_b\, T^{\alpha}_{ab}\,|n_a-1,\, n_b-1\rangle \qquad (a\neq b)\,. \qquad \text{(C.22)}$$

Passando ao caso em que a=b, temos, omitindo os índices,

$$\overline{T}^{\alpha}\,|n\rangle = P\,\overline{T}^{\alpha}\,|n-1\rangle + [\overline{T}^{\alpha},\, P]\,|n-1\rangle$$

$$= P\,\overline{T}^{\alpha}\,|n-1\rangle - 2\,U^{\alpha}\,|n-1\rangle \qquad \text{(C.23)}$$

Portanto

$$\overline{T}^{\alpha}\,|n\rangle = P\,\overline{T}^{\alpha}\,|n-1\rangle - 2(n-1)\,T^{\alpha}\,|n-2\rangle \qquad \text{(C.24)}$$

e mostra-se, mais um vez por indução, que

$$\overline{T}^{\alpha}\,|n\rangle = -n(n-1)\,T^{\alpha}\,|n-2\rangle\,. \qquad \text{(C.25)}$$

Ressaltamos, ainda, que

$$\bar{T}^{\alpha} |1\rangle = 0 \quad , \tag{C.26}$$

uma conseqüência imediata de (C.8).

C-3) FORMA DA DENSIDADE DE DUAS PARTÍCULAS

Ja definimos, em (III.28), os operadores densidade de duas partículas por

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,cd} = [\Lambda]^{-1/2} \left(Z^{\Lambda}_{cd} \bar{Z}^{\Lambda}_{ab} \right)^{0} , \tag{C.27}$$

de modo que a correspondente densidade no estado $|\phi\rangle$ é

$$\langle \phi | \Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,cd} | \phi \rangle = [\Lambda]^{-1/2} \langle \phi | \left(Z^{\Lambda}_{cd} \bar{Z}^{\Lambda}_{ab} \right)^{0} | \phi \rangle \quad . \tag{C.28}$$

Estamos aqui interessados em estados com senioridade nula e estes contêm apenas componentes com números de ocupação pares em cada orbital. Portanto a equação (C.28) produz um resultado nulo se o operador (C.27) alterar algum número de ocupação de um valor ímpar, e a densidade de duas partículas num estado com senioridade nulá só pode ser diferente de zero em um dos seguintes casos:

1º) $\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,ab}$ com $a \neq b$

2º) $\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\,cc}$ com $a \neq c$ e

3º) $\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\,aa}$.

A possibilidade restante, $\Gamma^{(\Lambda)}_{ba\,ab}$, reduz-se à primeira pela propriedade de simetria

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{ba\,ab} = -(-)^{a+b-\Lambda}\,\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,ab} \quad . \tag{C.29}$$

Consideremos cada caso separadamente:

<u>1º tipo</u>: $\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,ab}$ com $a \neq b$.

Comecemos fazendo o reacoplamento

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,cd} = -\frac{((A^a A^b)^\Lambda (B^a B^b)^\Lambda)^0}{[\Lambda]^{1/2}}$$

$$= \sum_\nu \begin{Bmatrix} a & b & \Lambda \\ a & b & \Lambda \\ \nu & \nu & 0 \end{Bmatrix} \frac{((A^a B^a)^\nu (A^b B^b)^\nu)^0}{[\Lambda]^{1/2}} \quad . \tag{C.30}$$

Como esse operador não altera nenhum número de ocupação, os únicos elementos de matriz relevantes para estados com seniori<u>dade</u> nula são do tipo

$$\langle n_a n_b | ((A^a B^a)^\nu (A^b B^b)^\nu)^0 | n_a n_b \rangle =$$

$$\left(\langle n_a | (A^a B^a)^\nu | n_a \rangle \langle n_b | (A^b B^b)^\nu | n_b \rangle\right)^0 \quad . \tag{C.31}$$

Pelo que vimos na seção II-7, cada um dos elementos de matriz no segundo membro dessa equação se anula para ν diferente de zero, restando de (C.30) apenas a contribuição

$$\frac{((A^a B^a)^0 (A^b B^b)^0)^0}{[\Lambda]^{1/2}} \begin{Bmatrix} a & b & \Lambda \\ a & b & \Lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix} = \frac{N_a N_b}{[ab\Lambda]^{1/2}} \left[\frac{\Lambda}{ab}\right]^{1/2} \delta(ab\Lambda) \quad . \tag{C.32}$$

Podemos, portanto, escrever (omitindo o delta de Racah)

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{a\,b\,a\,b} = \eta_{a\,b} + 0(v) \qquad (a \neq b) \tag{C.33}$$

onde definimos

$$\eta_{a\,b} = \frac{N_a N_b}{[a\,b]} \qquad (a \neq b) \tag{C.34}$$

e estamos denotando por 0(v) qualquer operador cujos elementos de matriz entre estados com senioridade nula se anulam.

2º tipo: $\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\;cc}$ com a ≠ c.

Neste caso os únicos elementos de matriz que interessam, para estados com senioridade nula, são do tipo

$$\langle n'_a\, n'_c | \Gamma^{(\Lambda)}_{a\,a\,c\,c} | n_a\, n_c \rangle =$$

$$[\Lambda]^{-1/2} \left(\langle n'_c | Z^{\Lambda}_{cc} | n_c \rangle \langle n'_a | \overline{Z}^{\Lambda}_{aa} | n_a \rangle \right)^0 . \tag{C.35}$$

De novo pelos resultados da seção II-7, cada um dos elementos de matriz no segundo membro se anula para Λ diferente de zero, e podemos escrever

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\;cc} = \delta_{\Lambda 0}\, \gamma_{ac} + 0(v) \quad \text{(para a≠c)}, \tag{C.36}$$

com a definição

$$\gamma_{ac} = Z_c\, \overline{Z}_a \qquad \text{(para a≠c)} \tag{C.37}$$

3º tipo: $\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\ aa}$.

Omitindo o índice do orbital e considerando inicialmente o caso $\Lambda = 0$, temos

$$\Gamma^{(0)} = (Z^0 \bar{Z}^0)^0 = Z\bar{Z} = \frac{1}{\Omega} P\bar{P} \quad . \qquad (C.38)$$

Como estamos interessados em senioridade nula, os únicos estados relevantes são do tipo (C.9), para os quais

$$\Gamma^{(0)} |n\rangle = n\left(1 - \frac{n-1}{\Omega}\right) |n\rangle \quad , \qquad (C.39)$$

conforme a equação (C.13), o que nos permite escrever

$$\Gamma^{(0)} = \frac{N}{2}\left(1 - \frac{N-2}{2\Omega}\right) + O(v) \quad . \qquad (C.40)$$

Resta ver o caso $\Lambda \neq 0$, ao qual nos restringiremos no que segue. Com a notação da seção anterior

$$\Gamma^{(\Lambda)} = \frac{(T^\wedge \bar{T}^\wedge)^0}{2[\Lambda]^{1/2}} \qquad (C.41)$$

e, pela equação (C.25),

$$\Gamma^{(\Lambda)} |n\rangle = -\frac{n(n-1)}{2[\Lambda]^{1/2}} (T^\wedge T^\wedge)^0 |n-2\rangle \quad . \qquad (C.42)$$

Embora essa equação o sugira, não podemos afirmar que $\Gamma^{(\Lambda)}|n\rangle$ tenha senioridade quatro. Com efeito, reacoplando o operador no seu segundo membro, seria fácil fazer aparecerem componentes com senioridade igual a zero. Entretanto, já que no presente caso o único estado com essa senioridade é $|n\rangle$,

é possível separar as duas componentes como segue:

$$\Gamma^{(\wedge)}|n\rangle = \frac{\langle n|\Gamma^{(\wedge)}|n\rangle}{\langle n|n\rangle}\,|n\rangle + |v=4\rangle \quad . \tag{C.43}$$

Para determinarmos o coeficiente de $|n\rangle$ acima, notamos inicialmente que

$$(\bar{T}^{\wedge}T^{\wedge})^{0} = (T^{\wedge}\bar{T}^{\wedge})^{0} + [\bar{T}^{\wedge}, T^{\wedge}]^{0} \tag{C.44}$$

e

$$[\bar{T}^{\wedge}, T^{\wedge}]^{0} = 2[\bar{Z}^{\wedge}, Z^{\wedge}] = 2[\wedge]^{1/2}\left(1 - \frac{N}{\Omega}\right) \quad ; \tag{C.45}$$

conseqüentemente,

$$\frac{(\bar{T}^{\wedge}T^{\wedge})^{0}}{2[\wedge]^{1/2}} = \frac{(T^{\wedge}\bar{T}^{\wedge})^{0}}{2[\wedge]^{1/2}} + \left(1 - \frac{N}{\Omega}\right) \quad . \tag{C.46}$$

Por outro lado, de (C.25) e seu conjugado decorre que

$$\langle n|(T^{\wedge}\bar{T}^{\wedge})^{0}|n\rangle = [-n(n-1)]^{2}\langle n-2|(\bar{T}^{\wedge}T^{\wedge})^{0}|n-2\rangle \quad , \tag{C.47}$$

podendo-se escrever

$$\langle n|\Gamma^{(\wedge)}|n\rangle = [n(n-1)]^{2}\left\{\langle n-2|\Gamma^{(\wedge)}|n-2\rangle + \langle n-2|\left(1-\frac{N}{\Omega}\right)|n-2\rangle\right\} \tag{C.48}$$

ou ainda, usando-se (C.15),

$$\frac{\langle n|\Gamma^{(\wedge)}|n\rangle}{(n!)^{2}} = \frac{\langle n-2|\Gamma^{(\wedge)}|n-2\rangle}{[(n-2)!]^{2}} + \left(1-2\,\frac{n-2}{\Omega}\right)\binom{\Omega}{n-2}\langle 0|0\rangle \quad . \tag{C.49}$$

Essa relação pode ser iterada (ver apêndice D), obtendo-se

$$\langle n|\Gamma^{(\Lambda)}|n\rangle = (n!)^2 \binom{\Omega-2}{n-2} \langle 0|0\rangle \quad , \qquad \text{(C.50)}$$

de onde se conclui que

$$\frac{\langle n|\Gamma^{(\Lambda)}|n\rangle}{\langle n|n\rangle} = \frac{n(n-1)}{\Omega(\Omega-1)} \qquad (\Lambda \neq 0) \quad . \qquad \text{(C.51)}$$

A rigor, como partimos de (C.49), a igualdade acima só está demonstrada para $n \geqslant 2$; porém, devido a (C.26), ela vale para qualquer n. Outro problema é que (C.50) só tem sentido para $\Omega > 2$, e (já que para $\Lambda \neq 0$ não interessa o valor $\Omega = 1$) nos resta analisar o caso em que $\Omega = 2$. Se n for 0 ou 1 o problema fica resolvido pelo que vimos acima; enquanto para n = 2 o princípio de Pauli nos diz que $\Gamma^{\Lambda}|2\rangle = 0$, resultando $\Gamma^{(\Lambda)}|2\rangle = |2\rangle$ pela equação (C.46), o que mostra que (C.51) permanece válida também nesse caso.

Voltando à equação (C.43), temos, portanto,

$$\Gamma^{(\Lambda)}|n\rangle = \frac{n(n-1)}{\Omega(\Omega-1)}|n\rangle + |v=4\rangle \quad , \qquad \text{(C.52)}$$

o que nos permite escrever

$$\Gamma^{(\Lambda)} = \frac{N(N-2)}{2\Omega(2\Omega-2)} + O(v) \qquad (\Lambda \neq 0) \quad . \qquad \text{(C.53)}$$

Combinando essa igualdade com (C.40) obtemos a seguinte relação, válida para qualquer Λ:

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\,aa} = \eta_{aa} + \delta_{10}\,\gamma_{aa} + O(v) \quad , \qquad \text{(C.54)}$$

onde colocamos de volta os índices e definimos

$$\eta_{aa} = \frac{N_a(N_a-2)}{[a]([a]-2)} \qquad (C.55)$$

e

$$\gamma_{aa} = \frac{1}{2}\left(N_a - [a]\,\eta_{aa}\right) \quad . \qquad (C.56)$$

Parece, à primeira vista, haver um problema para a = 1/2, quando surgiria um denominador nulo em (C.55). Porém estamos interessados em η_{aa} apenas para o cálculo de $\Gamma^{(\Lambda)}_{aa\ aa}$ e, se a = 1/2, somente o valor $\Lambda = 0$ é permitido, tendo-se, pelas equações acima,

$$\begin{aligned}\Gamma^{(0)}_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}\frac{1}{2}} &= \eta_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + \gamma_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + O(v) \\ &= \frac{1}{2}N_{\frac{1}{2}} + \left(1 - \frac{[1/2]}{2}\right)\eta_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}} + O(v) \\ &= \frac{1}{2}N_{\frac{1}{2}} + O(v) \quad .\end{aligned} \qquad (C.57)$$

Portanto a densidade de duas partículas independe de $\eta_{\frac{1}{2}\frac{1}{2}}$ e, dando-se a este um valor arbitrário, fica resolvido o problema.

Visto que (C.33), (C.36) e (C.54), juntamente com (C.29), são as únicas possibilidades para $\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\ cd}$ em estados com senioridade nula, podemos escrever

$$\begin{aligned}\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,cd} = {} & \frac{\delta_{ac}\delta_{bd} - (-)^{a+b-\Lambda}\delta_{bc}\delta_{ad}}{1+\delta_{ab}}\,\eta_{ab} \\ & + \delta_{\Lambda 0}\,\delta_{ab}\,\delta_{cd}\,\gamma_{ac} + O(v) \quad ,\end{aligned} \qquad (C.58)$$

onde o denominador $1 + \delta_{ab}$ serve para compensar a dupla contagem quando a = b. Com as definições (III.22) e (III.56), essa

equação toma a forma

$$\Gamma^{(\Lambda)}_{ab\,cd} = \eta_{ab}\,\zeta^2_{ab}\,\phi_{ab\Lambda}\,\delta_{ac}\,\delta_{bd} + \gamma_{ac}\,\delta_{10}\,\delta_{ab}\,\delta_{cd} + 0(v) \quad . \tag{C.59}$$

Lembremos que

$$\eta_{ab} = \frac{N_a\,(N_b - 2\,\delta_{ab})}{[a]\,([b] - 2\,\delta_{ab})} \quad , \tag{C.60}$$

$$\gamma_{ac} = \begin{cases} Z_c\,\bar{Z}_a & \text{se } a \neq c \text{ e} \\ \frac{1}{2}\,(N_a - [a]\,\eta_{aa}) & \text{se } a = c \end{cases} \tag{C.61}$$

e 0(v) é qualquer operador cujos elementos de matriz entre estados com senioridade nula se anulam. É fácil demonstrar as seguintes propriedades:

$$\eta^{\dagger}_{ab} = \eta_{ab} = \eta_{ba} \quad , \tag{C.62}$$

$$\gamma^{\dagger}_{ac} = \gamma_{ca} \quad , \tag{C.63}$$

$$0 \leq \langle \eta_{ab} \rangle \leq 1 \tag{C.64}$$

e

$$0 \leq \langle \gamma_{aa} \rangle \leq \left\langle \frac{N_a}{2} \right\rangle \quad , \tag{C.65}$$

onde $\langle . \rangle$ indica o valor de espera em qualquer estado e supõe se que $\eta_{\frac{1}{2}\,\frac{1}{2}}$ tenha sido convenientemente escolhido.

APÊNDICE D

CÁLCULOS AUXILIARES

D-1) INTRODUÇÃO

Incluímos neste apêndice alguns cálculos que, por serem demasiadamente longos, julgamos inconveniente inserir no texto principal. Assim nas seções D-2, D-3 e D-4 são derivadas as equações (VI.27), (VI.30,31) e (C.50) respectivamente.

D-2) DERIVAÇÃO DA EQUAÇÃO (VI.27)

Para derivarmos esta equação, introduzimos no seu primeiro membro o resultado (VI.25), obtendo para a contribuição proporcional aos η_{ab}

$$\zeta_{rs}\,\zeta_{tu}\,\phi_{rs\lambda}\,\phi_{tu\lambda}\sum_{bc\nu\Omega}\frac{[\Omega\nu]}{\zeta_{rb}\,\zeta_{tb}\,\zeta_{cu}\,\zeta_{cs}}\begin{Bmatrix}\mu & \Omega & c\\ \lambda & r & s\\ t & b & \nu\end{Bmatrix}W^{(\Omega)}_{rbc\mu}$$

$$\langle\phi|\eta_{cs}|\phi\rangle\,\zeta^{2}_{cs}\,\phi_{cs\nu}\,\delta_{ct}\,\delta_{sb}\;=$$

$$\zeta_{rs}\,\zeta_{tu}\,\phi_{rs\lambda}\,\phi_{tu\lambda}\sum_{bc\Omega}\frac{[\Omega]}{\zeta_{rb}\,\zeta_{tb}\,\zeta_{cu}\,\zeta_{cs}}\,W^{(\Omega)}_{rbc\mu}\,\langle\phi|\eta_{cs}|\phi\rangle$$

$$\zeta^{2}_{cs}\sum_{\nu}[\nu]\begin{Bmatrix}\mu & \Omega & c\\ \lambda & r & s\\ t & b & \nu\end{Bmatrix}\phi_{cs\nu}\,\delta_{ct}\,\delta_{sb}\qquad(D.1)$$

Partindo de

$$\sum_{\nu} [\nu] \begin{Bmatrix} u & \Omega & t \\ \Lambda & r & s \\ t & s & \nu \end{Bmatrix} = \frac{\delta_{\Lambda\Omega}}{[\Omega]} \quad , \tag{D.2}$$

retirada de (ShT 63, p.518), e de

$$\sum_{\nu} (-)^{b+s-\nu} [\nu] \begin{Bmatrix} u & \Omega & b \\ \Lambda & r & s \\ s & b & \nu \end{Bmatrix} =$$

$$(-)^{2(b+s)} (-)^{b+r+\Omega} (-)^{u+s+\Lambda} \sum_{\nu} [\nu] \begin{Bmatrix} \Omega & u & b \\ r & \Lambda & s \\ b & s & \nu \end{Bmatrix} =$$

$$(-)^{b+r+\Omega} (-)^{u+s+\Lambda} \frac{\delta_{ur}}{[r]} \quad , \tag{D.3}$$

que se obtém de (D.2) usando-se a simetria dos símbolos de 9j (seção II-6), construímos a identidade

$$\sum_{\nu} [\nu] \begin{Bmatrix} u & \Omega & c \\ \Lambda & r & s \\ t & b & \nu \end{Bmatrix} \phi_{cs\nu} \, \delta_{ct} \, \delta_{sb} = \frac{\delta_{ct} \, \delta_{bs} \, \delta_{\Lambda\Omega}}{[\Omega]}$$

$$- (-)^{b+r+\Omega+u+s+\Lambda} \frac{\delta_{bc} \, \delta_{st} \, \delta_{ur}}{[r]} \quad , \tag{D.4}$$

que, introduzida em (D.1), dá para essa contribuição

$$\zeta_{rs} \, \zeta_{tu} \, \phi_{rs\Lambda} \, \phi_{tu\Lambda} \left\{ \frac{1}{\zeta_{rs} \, \zeta_{ts} \, \zeta_{tu} \, \zeta_{ts}} \, W^{(\Lambda)}_{rs\,tu} \, \langle \phi | \eta_{ts} | \phi \rangle \, \zeta^2_{ts} \right.$$

$$\left. - (-)^{b+r+\Omega+u+s+\Lambda} \sum_{b\Omega} \frac{\delta_{st} \, \delta_{ur} \, [\Omega]}{\zeta_{rb} \, \zeta_{tb} \, \zeta_{bu} \, \zeta_{bs} \, [r]} \, W^{(\Omega)}_{rb\,bu} \, \langle \phi | \eta_{bs} | \phi \rangle \, \zeta^2_{bs} \right\} =$$

$$\oint_{rs\wedge}\oint_{tu\wedge} W^{(\wedge)}_{rs\,tu}\,\langle\phi|\eta_{ts}|\phi\rangle$$

$$+\,\zeta_{rs}\,\zeta_{tu}\oint_{rs\wedge}\oint_{tu\wedge}(-)^{r+s+\wedge}\,\delta_{ts}\,\delta_{ur}\sum_{b}[b]\,\langle\phi|\eta_{bs}|\phi\rangle\,W_{rb} =$$

$$\oint_{rs\wedge}\oint_{tu\wedge} W^{(\wedge)}_{rs\,tu}\,\langle\phi|\eta_{ts}|\phi\rangle$$

$$-\,\zeta_{rs}\,\zeta_{tu}\oint_{rs\wedge}\oint_{tu\wedge}\delta_{rt}\,\delta_{su}\sum_{b}[b]\,\langle\phi|\eta_{br}|\phi\rangle\,W_{sb}\;, \qquad \text{(D.5)}$$

onde usamos (III.46) e (III.60). Pelas propriedades (III.88) e (III.75), esse resultado é equivalente a

$$\oint_{rs\wedge}\oint_{tu\wedge} W^{(\wedge)}_{rs\,tu}\,\langle\phi|\eta_{ts}|\phi\rangle$$

$$-\,\delta_{rt}\,\delta_{su}\sum_{b}[b]\left(\langle\phi|\eta_{br}|\phi\rangle\,W_{sb}+\langle\phi|\eta_{bs}|\phi\rangle\,W_{rb}\right) \qquad \text{(D.6)}$$

e, expandindo o primeiro termo e usando a propriedade (C.62), obtemos para a contribuição (D.1):

$$W^{(\wedge)}_{rs\,tu}\,\langle\phi|(\eta_{rt}+\eta_{ru}+\eta_{st}+\eta_{su})|\phi\rangle$$

$$-\,\delta_{rt}\,\delta_{su}\sum_{b}[b]\left(\langle\phi|\eta_{br}|\phi\rangle\,W_{sb}+\langle\phi|\eta_{bs}|\phi\rangle\,W_{rb}\right)\;. \qquad \text{(D.7)}$$

Passando à contribuição proporcional aos γ_{ac} e procedendo analogamente, obtemos

$$\delta_{rs}\,\delta_{tu}\,\phi_{rs\wedge}\,\phi_{tu\wedge}\sum_{bc\nu\Omega}\frac{[\Omega\nu]}{\delta_{rb}\,\delta_{tb}\,\delta_{cu}\,\delta_{cs}}\begin{Bmatrix}u & \Omega & c\\ \wedge & r & s\\ t & b & \nu\end{Bmatrix}W^{(\Omega)}_{rb\,cu}$$

$$\langle\phi|\,\gamma_{ct}\,|\phi\rangle\,\delta_{\nu 0}\,\delta_{cs}\,\delta_{tb}\;=$$

$$\phi_{rs\wedge}\,\phi_{tu\wedge}\,2\,\frac{\delta_{rs}\,\delta_{tu}}{\delta_{rt}\,\delta_{su}}\sum_{\Omega}[\Omega]\begin{Bmatrix}u & \Omega & s\\ \wedge & r & s\\ t & t & 0\end{Bmatrix}W^{(\Omega)}_{rt\,su}\,\langle\phi|\,\gamma_{st}\,|\phi\rangle \qquad (D.8)$$

Usando as propriedades (III.111) e (III.113) dos símbos de 9j, vemos que

$$\begin{Bmatrix}u & \Omega & s\\ \wedge & r & s\\ t & t & 0\end{Bmatrix}=\left[\frac{\Omega\wedge}{st}\right]^{1/2}\begin{Bmatrix}u & s & \Omega\\ t & r & \Omega\\ \wedge & \wedge & 0\end{Bmatrix}=[st\Omega\wedge]^{-1/2}\overline{\begin{Bmatrix}r & t & \Omega\\ s & u & \Omega\\ \wedge & \wedge & 0\end{Bmatrix}}\quad, \qquad (D.9)$$

e o somatório em (D.8) escreve-se

$$\sum_{\Omega}[\Omega]\begin{Bmatrix}u & \Omega & s\\ \wedge & r & s\\ t & t & 0\end{Bmatrix}W^{(\Omega)}_{rt\,su}\;=$$

$$[st\wedge]^{-1/2}\sum_{\Omega}[\Omega]^{1/2}\overline{\begin{Bmatrix}r & t & \Omega\\ s & u & \Omega\\ \wedge & \wedge & 0\end{Bmatrix}}\,W^{(\Omega)}_{rt\,su}=[st\wedge]^{-1/2}\,\beta^{(\wedge)}_{rs\,tu}\quad, \qquad (D.10)$$

com $\beta^{(\wedge)}_{rs\,tu}$ dado por (III.41). Preferimos, no entanto, trabalhar com a interação multipolar $F^{(\wedge)}_{rs\,tu}$ definida em (III.42), em termos da qual a contribuição (D.8) fica sendo

$$\phi_{rs\wedge}\,\phi_{tu\wedge}\,F^{(\wedge)}_{rs\,tu}\;\frac{\langle\phi|\gamma_{st}|\phi\rangle}{[st]^{1/2}} \qquad \text{(D.11)}$$

Em vista de (D.7) e (D.11) temos, então,

$$\delta_{rs}\,\delta_{tu}\,\phi_{rs\wedge}\,\phi_{tu\wedge}\sum_{bc\nu\Omega}\frac{[\Omega\nu]}{\delta_{rb}\,\delta_{tb}\,\delta_{cu}\,\delta_{cs}}\begin{Bmatrix}u & \Omega & c\\ \wedge & r & s\\ t & b & \nu\end{Bmatrix}$$

$$W^{(\Omega)}_{rb\,cu}\,\langle\phi|\,\Gamma^{(\nu)}_{cs\,tb}\,|\phi\rangle\;=$$

$$W^{(\wedge)}_{rs\,tu}\,\langle\phi|(\eta_{rt}+\eta_{ru}+\eta_{st}+\eta_{su})|\phi\rangle$$

$$-\delta_{rt}\,\delta_{su}\sum_{b}[b]\left(\langle\phi|\eta_{br}|\phi\rangle W_{sb}+\langle\phi|\eta_{bs}|\phi\rangle W_{rb}\right)$$

$$+\phi_{rs\wedge}\,\phi_{tu\wedge}\,F^{(\wedge)}_{rs\,tu}\;\frac{\langle\phi|\gamma_{st}|\phi\rangle}{[st]^{1/2}}\quad, \qquad \text{(D.12)}$$

sempre que $|\phi\rangle$ tiver senioridade nula e, portanto, a densidade de duas partículas for dada por (VI.25).

D-3) DERIVAÇÃO DAS EQUAÇÕES (VI.30) e (VI.31)

Pelos resultados da subseção IV-5.3, matriz de correção para seis partículas ativas é dada por

$$h^{(\wedge)}_{rs\,tu}(6)=k^{(\wedge)}_{rs\,tu}(6)+v^{(\wedge)}_{rs\,tu}(6)\quad, \qquad \text{(D.13)}$$

onde

$$k^{(\Lambda)}_{rs\,tu}(6) = \sum_a \varepsilon_a \frac{\langle 4|(Z^{\Lambda}_{tu} N_a \bar{Z}^{\Lambda}_{rs})^0|4\rangle}{[\Lambda]^{1/2}} \qquad \text{(D.14)}$$

e

$$v^{(\Lambda)}_{rs\,tu}(6) = \sum_{\substack{abcd:\Omega \\ (a\le b,\, c\le d)}} W^{(\Omega)}_{abcd} \left[\frac{\Omega}{\Lambda}\right]^{1/2} \langle 4|(Z^{\Lambda}_{tu}(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd})^0 \bar{Z}^{\Lambda}_{rs})^0|4\rangle \ , \qquad \text{(D.15)}$$

com $|4\rangle$ dado por (VI.13).

Considerando inicialmente o caso $\Lambda \neq 0$ e usando as equações (C.22) e (C.25), obtemos

$$\bar{Z}^{\Lambda}_{rs} Z_a Z_b |0\rangle = -\frac{2}{[rs]^{1/2}} (\delta_{ra}\delta_{sb} + \delta_{rb}\delta_{sa}) Z^{\Lambda}_{rs}|0\rangle \ , \qquad \text{(D.16)}$$

que introduzido em (VI.13) dá

$$\bar{Z}^{\Lambda}_{rs}|4\rangle = -\frac{2}{[rs]^{1/2}} \mu_{rs} Z^{\Lambda}_{rs}|0\rangle \ , \qquad \text{(D.17)}$$

com μ_{rs} definido em (VI.14). Temos então

$$\langle 4|(Z^{\Lambda}_{tu} N_a \bar{Z}^{\Lambda}_{rs})^0|4\rangle =$$

$$\frac{4}{[rstu]^{1/2}} \mu_{rs}\mu^*_{tu} \langle 0|(\bar{Z}^{\Lambda}_{tu} N_a Z^{\Lambda}_{rs})^0|0\rangle =$$

$$\frac{4}{[rstu]^{1/2}} \mu_{rs}\mu^*_{tu} (\delta_{ra} + \delta_{sa}) \langle 0|(\bar{Z}^{\Lambda}_{tu} Z^{\Lambda}_{rs})^0|0\rangle \qquad \text{(D.18)}$$

e, lembrando que (seção III-2)

$$\langle 0|(\bar{Z}^{\Lambda}_{tu} Z^{\Lambda}_{rs})^0|0\rangle = [\Lambda]^{1/2} \delta_{rt}\,\delta_{su} \qquad (r\le s \ e \ t\le u) \ , \qquad \text{(D.19)}$$

obtemos

$$\frac{\langle 4|(\bar{Z}^{\Lambda}_{tu} N_a Z^{\Lambda}_{rs})^0|4\rangle}{[\Lambda]^{1/2}} = \frac{4|u_{rs}|^2}{[rs]} (\delta_{ra}+\delta_{sa})\,\delta_{rt}\,\delta_{su} \quad . \tag{D.20}$$

Portanto,

$$k^{(\Lambda)}_{rs\,tu}(6) = \delta_{rt}\,\delta_{su}\,\frac{4|u_{rs}|^2}{[rs]}\,(\varepsilon_r+\varepsilon_s) \tag{D.21}$$

para $\Lambda \neq 0$, $r \leq s$ e $t \leq u$.

Por outro lado, para $\Lambda \neq 0$, $a \leq b$, $c \leq d$, $r \leq s$ e $t \leq u$,

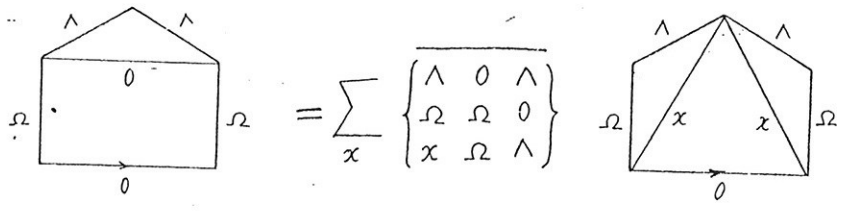
$$\langle 4|(Z^{\Lambda}_{tu}(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd})^0 \bar{Z}^{\Lambda}_{rs})^0|4\rangle =$$

$$\frac{4\,u_{rs}\,u^*_{tu}}{[rs\,tu]^{1/2}} \langle 0|(\bar{Z}^{\Lambda}_{tu}(Z^{\Omega}_{ab}\bar{Z}^{\Omega}_{cd})^0 Z^{\Lambda}_{rs}|0\rangle =$$

$$\frac{4\,u_{rs}\,u^*_{tu}}{[rs\,tu]^{1/2}} [\Lambda]^{-1} \langle 0|(\bar{Z}^{\Lambda}_{tu} Z^{\Omega}_{ab})^0|0\rangle \langle 0|(\bar{Z}^{\Omega}_{cd} Z^{\Lambda}_{rs})^0|0\rangle =$$

$$\frac{4\,u_{rs}\,u^*_{tu}}{[rs\,tu]^{1/2}}\,\delta_{at}\,\delta_{bu}\,\delta_{cr}\,\delta_{ds}\,\delta_{\Lambda\Omega} \quad , \tag{D.22}$$

onde usamos o reacoplamento (II.102),



, (D.23)

e o valor particular (III.121), ou melhor,

$$\overline{\begin{Bmatrix} \Lambda & 0 & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \\ x & \Omega & \Lambda \end{Bmatrix}} = [\Lambda \Omega x]^{1/2} \begin{Bmatrix} \Lambda & 0 & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \\ x & \Omega & \Lambda \end{Bmatrix} = (-)^{\Lambda+\Omega+x} [x]^{1/2} \begin{Bmatrix} \Omega & x & \Lambda \\ 0 & \Lambda & \Lambda \\ \Omega & \Omega & 0 \end{Bmatrix}'$$

$$= (-)^{\Lambda+\Omega+x} \left[\frac{x}{\Omega \Lambda}\right]^{1/2} \delta(\Lambda \Omega x) \quad . \tag{D.24}$$

Introduzindo (D.22) em (D.15), obtemos

$$v^{(\Lambda)}_{rs\,tu}(6) = \frac{4 \mu_{rs} \mu^{*}_{tu}}{[rs\,tu]^{1/2}} W^{(\Lambda)}_{tu\,rs} \quad , \tag{D.25}$$

que juntamente com (D.21) e (D.13) dá

$$h^{(\Lambda)}_{rs\,tu}(6) = \delta_{rt}\,\delta_{su}\,\frac{4|\mu_{rs}|^2}{[rs]}(\varepsilon_r + \varepsilon_s)$$

$$+ \frac{4 \mu_{rs} \mu^{*}_{tu}}{[rs\,tu]^{1/2}} W^{(\Lambda)}_{tu\,rs} \quad , \tag{D.26}$$

que é a equação (VI.30), válida para $\Lambda \neq 0$, $r \leq s$ e $t \leq u$.

Passando ao caso em que $\Lambda = 0$ as equações (D.14) e (D.15) reduzem-se simplesmente a

$$k^{(0)}_{rr\,tt}(6) = \sum_a \varepsilon_a \langle 4 | Z_t N_a \bar{Z}_r | 4 \rangle \tag{D.27}$$

e

$$v^{(0)}_{rr\,tt}(6) = \sum_{\substack{abcd:\Omega \\ (a\leq b,\, c\leq d)}} W^{(\Omega)}_{ab\,cd} [\Omega]^{1/2} \langle 4 | Z_t (Z^{\Omega}_{ab} \bar{Z}^{\Omega}_{cd})^0 \bar{Z}_r | 4 \rangle \tag{D.28}$$

ou, usando a equação (VI.19) e procedendo como em (D.23),

$$k^{(0)}_{rr\,tt}(6) = \sum_a 2\,\varepsilon_a\,u'_{ra}\,u'^{*}_{ta} \qquad \text{e} \qquad \text{(D.29)}$$

$$v^{(0)}_{rr\,tt}(6) = \sum_{ac} u'_{ra}\,u'^{*}_{tc}\,W^{(0)}_{cc\,aa} \,. \qquad \text{(D.30)}$$

Finalmente, somando-se esses dois resultados, obtém-se:

$$h^{(0)}_{rr\,tt}(6) = \sum_a 2\,\varepsilon_a\,u'_{ra}\,u'^{*}_{ta} + \sum_{ac} u'_{ra}\,u'^{*}_{tc}\,W^{(0)}_{cc\,aa} \,, \qquad \text{(D.31)}$$

que é a equação (VI.31).

D-4) DERIVAÇÃO DA EQUAÇÃO (C.50)

A relação (C.49) tem a forma

$$x_n = x_{n-2} + a_{n-2} \,, \qquad \text{(D.32)}$$

com

$$x_n = \frac{\langle n|\Gamma^{(\wedge)}|n\rangle}{(n!)^2} \qquad (\wedge \neq 0) \qquad \text{(D.33)}$$

e

$$a_n = \left(1 - \frac{2n}{\Omega}\right)\binom{\Omega}{n}\langle 0|0\rangle \,. \qquad \text{(D.34)}$$

Notando que

$$x_0 = x_1 = 0 \qquad \text{(D.35)}$$

(ver equação (C.26)), é fácil iterar (D.32), obtendo-se

$$x_{2p} = \sum_{k=0}^{p-1} a_{2k} \tag{D.36}$$

e

$$x_{2p+1} = \sum_{k=0}^{p-1} a_{2k+1} \tag{D.37}$$

Para efetuar esses somatórios colocamos (D.34) na forma

$$a_n = \left(\frac{\Omega-n}{\Omega} - \frac{n}{\Omega}\right)\binom{\Omega}{n}\langle 0|0\rangle = \left\{\binom{\Omega-1}{n} - \binom{\Omega-1}{n-1}\right\}\langle 0|0\rangle \quad , \tag{D.38}$$

resultando

$$x_{2p} = \left\{\sum_{k=0}^{p-1}\binom{\Omega-1}{2k} - \sum_{k=1}^{p-1}\binom{\Omega-1}{2k-1}\right\}\langle 0|0\rangle = \sum_{k=0}^{2p-2}(-)^k\binom{\Omega-1}{k}\langle 0|0\rangle \tag{D.39}$$

e

$$x_{2p+1} = \left\{\sum_{k=0}^{p-1}\binom{\Omega-1}{2k-1} - \sum_{k=0}^{p-1}\binom{\Omega-1}{2k}\right\}\langle 0|0\rangle = -\sum_{k=0}^{2p-1}(-)^k\binom{\Omega-1}{k}\langle 0|0\rangle \tag{D.40}$$

ou, equivalentemente,

$$x_n = (-)^n \sum_{k=0}^{n-2}(-)^k\binom{\Omega-1}{k}\langle 0|0\rangle \tag{D.41}$$

Usando-se, agora, a identidade

$$\sum_{k=0}^{m}(-)^k\binom{n}{k} = (-)^m\binom{n-1}{m} \tag{D.42}$$

de (RyG 63, p.3), obtém-se

$$x_n = \binom{\Omega - 2}{n - 2} \langle 0|0 \rangle \quad , \tag{D.43}$$

o que justifica a equação (C.50).

APÊNDICE E

TABELAS

TABELA 1

82 < N ≤ 126					126 < N ≤ 184			
rótulo	nℓj	RiS[a]	Tru+[b]	KHe[c]	rótulo	nℓj	Tru+[b]	KHe[c]
5	2p1/2	0,00	0,000	- 7,38	2	1g9/2	0,000	- 3,94
3	1f5/2	-0,57	-0,570	- 7,95	1	0i11/2	0,781	- 3,15
4	2p3/2	-0,90	-0,897	- 8,27	7	0j15/2	1,428	- 2,53
6	0i13/2	-1,63	-1,633	- 9,01	4	2d5/2	1,573	- 2,36
2	1f7/2	-2,35	-2,339	- 9,72	6	3s1/2	2,039	- 1,91
1	0h9/2	-	-3,43	-10,85	3	1g7/2	2,496	- 1,45
					5	2d3/2	2,542	- 1,42

a) Richardson e Sherman (RiS64).

b) True, Ma e Pinkston (Tru + 71).

c) Kuo e Herling (KHe 71).

Tabela 1 - Orbitais para nêutrons nas camadas 82 <N ≤ 126 e 126 < N ≤ 184 com energias de partícula-única em MeV segundo diversos autores. O número quântico radial n segue a convenção de Moshinsky (BrM 67).

TABELA 2

N = 2		N = 4		N = 6	
EXT	EQM	EXT	EQM	EXT	EQM
-0,57	-0,57	-0,94	-0,94	-1,10	-1,10
1,20	1,20	0,66	0,67	0,32	0,32
		2,51		2,00	
				3,94	

Tabela 2 - Comparação das energias em MeV dos estados com senioridade nula para N partículas nos orbitais 1g9/2 e 0i11/2, com emparelhamento de G = 0,0865 MeV, calculadas exatamente (EXT) e com as equações de movimento (EQM).

TABELA 3

Configuração	N = 2		N = 4		N = 6	
	Componente	Amplitude	Componente	Amplitude	Componente	Amplitude
	(E= -0,57MeV)		(E= -0,94MeV)		(E= -1,10 MeV)	
$(1g9/2)^2$	0,960	0,960	0,758	1,225	0,715	1,320
$(0i11/2)^2$	0,279	0,279	0,179	0,391	0,119	0,474
	(E= 1,20 MeV)		(E= 0,67 MeV)		(E = 0,32 MeV)	
$(1g9/2)^2$	-0,279	-0,279	-0,313	-0,223	-0,361	-0,156
$(0i11/2)^2$	0,960	0,960	0,981	0,948	1,007	0,937

Tabela 3 - Componentes e amplitudes de excitação para estados finais com senioridade nula de N partículas nos orbitais 1g9/2 e 0i11/2, com emparelhamento de G = 0,0865 MeV, calculadas com as equações de movimento.

TABELA 4

^{206}Pb		^{204}Pb		^{202}Pb	
EXT	EQM	EXT	EQM	EXT	EQM
-0,59	-0,59	-0,60	-0,60	-0,21	-0,20
0,44	0,44	0,86	0,98	1,44	1,46
	1,58	1,13	1,16		1,83
	2,57		2,07		2,26
	4,43		3,91		4,01

Tabela 4 - Comparação das energias em MeV dos estados mais baixos com senioridade nula do $^{206,204,202}Pb$, com emparelhamento de G = 0,146 MeV nos orbitais 2p1/2, 1f5/2, 2p3/2, 0i13/2 e 1f7/2, calculadas exatamente (EXT), por Richardson e Sherman (RiS 64), e com as equações de movimento (EQM).

TABELA 5

Energia (MeV)		Confi	Componente		Amplitude	
com	sem	guração	com	sem	com	sem
-0,20	-0,37	$(2p1/2)^2$	0,406	0,221	0,491	0,471
1,46	1,51	$(1f5/2)^2$	0,474	0,531	0,957	0,967
1,83	2,23	$(2p3/2)^2$	0,251	0,273	0,611	0,612
2,26	3,99	$(0i13/2)^2$	0,229	0,253	0,678	0,680
4,01	4,17	$(1f7/2)^2$	0,110	0,123	0,356	0,358

Tabela 5 - Comparação das energias absolutas dos estados com seniori dade nula e das componentes e amplitudes de excitação do estado fundamental para o ^{202}Pb com emparelhamento de G=0,146 MeV, calculadas com as equações de movimento com e sem a matriz de correção.

TABELA 6

Núcleo	E (MeV)		Δ (MeV)	
	EQM	MTDA[a)]	EQM	MTDA[a)]
^{212}Pb	-1,69	-1,68	0,361	0,304
^{210}Pb	-0,97	-0,96	0,263	0,262
^{206}Pb	-0,21	-0,21	0,139	0,139
^{204}Pb	0,36	0,04	0,231	divergente

a) Ghosh e Goswami (GhG 72).

Tabela 6 - Comparação das energias (E) e dos parâmetros de "gap" (Δ) dos estados fundamentais de isótopos pares do chumbo obtidos com as equações de movimento (EQM) e com a MTDA para um emparelhamento de G = 0,0865 MeV.

TABELA 7

	^{206}Pb		^{204}Pb		
$r=n\ell j$	$X_r=s_r$	ρ_r	X_r	s_r	ρ_r
2p1/2	0,941	0,885	0,547	0,309	0,881
1f5/2	0,252	0,021	0,727	0,892	0,276
2p3/2	0,138	0,010	0,261	0,363	0,070
0i13/2	0,149	0,003	0,203	0,318	0,016
1f7/2	0,080	0,002	0,096	0,158	0,007
0h9/2	0,062	0,001	0,068	0,116	0,003

Tabela 7 - Componentes (X_r), amplitudes de excitação (s_r) e ocupações relativas (ρ_r) no estado fundamental do $^{206,204}Pb$ calculadas com as equações de movimento para emparelhamento de G = 0,0865 MeV.

TABELA 8

	Matriz-métrica para o ^{204}Pb					
	$(2p1/2)^2$	$(1f5/2)^2$	$(2p3/2)^2$	$(0i13/2)^2$	$(1f7/2)^2$	$(0h9/2)^2$
$(2p1/2)^2$	0,115					
$(1f5/2)^2$	0,237	1,021				
$(2p3/2)^2$	0,130	0,035	1,000			
$(0i13/2)^2$	0,140	0,038	0,021	1,016		
$(1f7/2)^2$	0,075	0,020	0,011	0,012	1,003	
$(0h9/2)^2$	0,058	0,016	0,009	0,009	0,005	1,002

Tabela 8 - Matriz-métrica para o cálculo do ^{204}Pb com emparelhamento de G = 0,0865 MeV usando as equações de movimento.

TABELA 9

	^{210}Pb		^{212}Pb		
$r=n\ell j$	$X_r=s_r$	ρ_r	X_r	s_r	ρ_r
1g9/2	0,861	0,148	0,660	1,111	0,291
0i11/2	0,361	0,022	0,263	0,523	0,047
0j15/2	0,276	0,010	0,192	0,395	0,020
2d5/2	0,157	0,008	0,109	0,225	0,017
3s1/2	0,074	0,006	0,050	0,105	0,011
1g7/2	0,125	0,004	0,084	0,178	0,008
2d3/2	0,087	0,004	0,059	0,124	0,008

Tabela 9 - Componentes (X_r), amplitudes de excitação (s_r) e ocupações relativas (ρ_r) no estado fundamental do $^{210,212}Pb$ calculadas com as equações de movimento para emparelhamento de G = 0,0865 MeV.

TABELA 10

Matriz-métrica para o ^{212}Pb

	$(1g9/2)^2$	$(0i11/2)^2$	$(0j15/2)^2$	$(2d5/2)^2$	$(3s1/2)^2$	$(1g7/2)^2$	$(2d3/2)^2$
$(1g9/2)^2$	1,444						
$(0i11/2)^2$	0,310	1,087					
$(0j15/2)^2$	0,237	0,099	1,057				
$(2d5/2)^2$	0,135	0,057	0,043	1,008			
$(3s1/2)^2$	0,064	0,027	0,020	0,012	0,995		
$(1g7/2)^2$	0,108	0,045	0,034	0,020	0,009	1,008	
$(2d3/2)^2$	0,075	0,031	0,024	0,014	0,006	0,011	1,000

Tabela 10 - Matriz-métrica para o cálculo do ^{212}Pb com empare - lhamento de G = 0,0865 MeV usando as equações de movimento.

TABELA 11

	Energia de excitação (MeV)									
	^{210}Pb		^{212}Pb		^{214}Pb		$\sigma(212,J^\pi)/\sigma(210,J^\pi)$			$\frac{\sigma(214,J^\pi)}{\sigma(210,J^\pi)}$
J^π	EXP[a]	EQM	EXP[b]	EQM	EXP[c]	EQM	EXP[d]	EQM	MCA[e]	EQM
0^+	0	0	0	0	0	0	2,3	1,9	1,7	2,6
2^+	0,80	0,80	0,80	0,87	0,84	0,95	1,1	1,0	0,7	1,0
4^+	1,09	1,06	1,12	1,14			1,5	0,8	0,6	
6^+	1,19	1,15	1,28	1,24			1,2	0,8	0,6	
8^+	1,27	1,19	1,34	1,28			1,1	0,7		

a) Medidos por Flynn e colaboradores (Fly + 72).

b) Adotados por Martin (Mar 79).

c) Adotados por Toth (Tot 77).

d) Medidos por Ellegaard e colaboradores (Ell+71).

e) Cálculo de modelo de camadas (McK 75).

Tabela 11 - Valores experimentais (EXP) e calculados com as equações de movimento (EQM) para energias de excitação do ^{210,212,214}Pb e seções de choque relativas das reações ^{210}Pb(t,p)^{212}Pb e ^{212}Pb(t,p)^{214}Pb. (Para a última não há dados experimentais).

TABELA 12

J_i^π	Energia de excitação (MeV) ^{206}Pb			$\sigma(206,J_i^\pi)/\sigma(206,J_1^\pi)$		
	EXP[a,b]	EQM	MCA[c]	EXP[a]	EQM	MCA[c]
0_1^+	0	0	0	1	1	1
0_2^+	1,17	1,10	1,16	0,10	0,02	0,02
0_3^+	2,31	2,26	2,33	0,17	0,21	0,16
2_1^+	0,80	0,80	0,89	1	1	1
2_2^+	1,47	1,36	1,39	0,15	0,09	0,04
2_3^+	1,78	1,78	1,82	0,01	0,00	0,01
4_1^+	1,68	1,76	1,81	1	1	1
4_2^+	2,00	2,04	2,05	0,42	0,22	0,40
4_3^+	2,93	2,93	2,98	0,25	0,31	0,32
6_1^+	3,26[d]	3,23		1	1	

a) Medidos por Lanford (Lan 77).

b) Adotados por Webb (Web 79).

c) Calculados por McGrory e Kuo (McK 75).

d) Valor de J^π baseado somente em Lanford (Lan 77).

Tabela 12 - Valores experimentais (EXP) e calculados com as equações de movimento (EQM) e pelo modelo de camadas (MCA) para energias de excitação do ^{206}Pb e seções de choque relativas da reação $^{208}Pb(p,t)^{206}Pb$.

TABELA 13

J_i^π	Energia de excitação (MeV) ^{204}Pb EXP[a,b]	EQM	MCA[c]	$\sigma(204,J_i^\pi)/\sigma(206,J_1^\pi)$ EXP[a]	EQM	MCA[c]
0_1^+	0	0	0	1,74	1,70	1,65
0_2^+	1,58[d]	1,44	1,42	0,10[d]	0,08	0,09
0_3^+	1,73	1,99		0,17	0,06	
2_1^+	0,90	0,94	1,00	0,63	0,71	0,70
2_2^+	1,35	1,59	1,48	0,02	0,02	0,03
2_3^+	1,66	1,63	1,60	0,12	0,01	0,03
2_4^+	1,96	1,81		0,05	0,05	
4_1^+	1,27	1,45	1,37	0,65	0,79	0,69
4_2^+	1,56	1,73	1,61	0,22	0,04	0,02
4_3^+	1,82	3,00	2,05	0,05	0,29	0,20
6_1^+	2,81	2,84		0,77	0,84	

a) Medidos por Lanford (Lan 77).

b) Adotados por Schmorak (Sch 79).

c) Calculados por McGrory e Kuo (McK 75).

d) J^π duvidoso.

Tabela 13 - Valores experimentais (EXP) e calculados com as equações de movimento (EQM) e pelo modelo de camadas (MCA) para energias de excitação do ^{204}Pb e seções de choque relativas da reação $^{206}Pb(p,t)^{204}Pb$.

TABELA 14

J_i^π	Energia de excitação (MeV) ^{202}Pb EXP[a,b]	EQM	$\sigma(202,J_i^\pi)/\sigma(206,J_1^\pi)$ EXP[a]	EQM
0_1^+	0,00	0,00	2,31	2,31
2_1^+	0,96	1,01	0,56	0,54
2_2^+	1,58[c]	1,68	0,03[c]	0,00
2_3^+	1,66[c]	1,79	0,02	0,04
4_1^+	1,38	1,50	0,48	0,57
4_2^+	1,62	1,81	0,09	0,00
4_3^+	1,92	2,92	0,07	0,25
6_1^+	2,75[c]	2,74	0,55	0,63

a) Medidos por Lanford (Lan 77).

b) Adotados por Schmorak (Sch 78).

c) J^π duvidoso.

Tabela 14 - Valores experimentais (EXP) e calculados com as equações de movimento (EQM) para energias de excitação do ^{202}Pb e seções de choque relativas da reação $^{204}Pb(p,t)^{202}Pb$.

TABELA 15

		Erro na energia do estado fundamental (MeV)						
cálculo	interação	^{210}Pb	^{212}Pb	^{214}Pb	interação	^{206}Pb	^{204}Pb	^{202}Pb
EQM	HK1	0,05	0,09	0,06	HK4	-0,08	-0,46	-1,05
MCA[a)]	HK2	-0,06	-0,18		HK3	-0,12	-0,63	
EQM					HK3	-0,12	-0,61	-1,37

a) McGrory e Kuo (McK 75)

Tabela 15 - Erro nas energias dos estados fundamentais de isótopos pares do chumbo calculadas com as equações de movimento (EQM) e com o modelo de camadas (MCA). As interações efetivas são explicadas nas seções VI-5 e VI-6.

APÊNDICE F

F I G U R A S

FIGURA 1

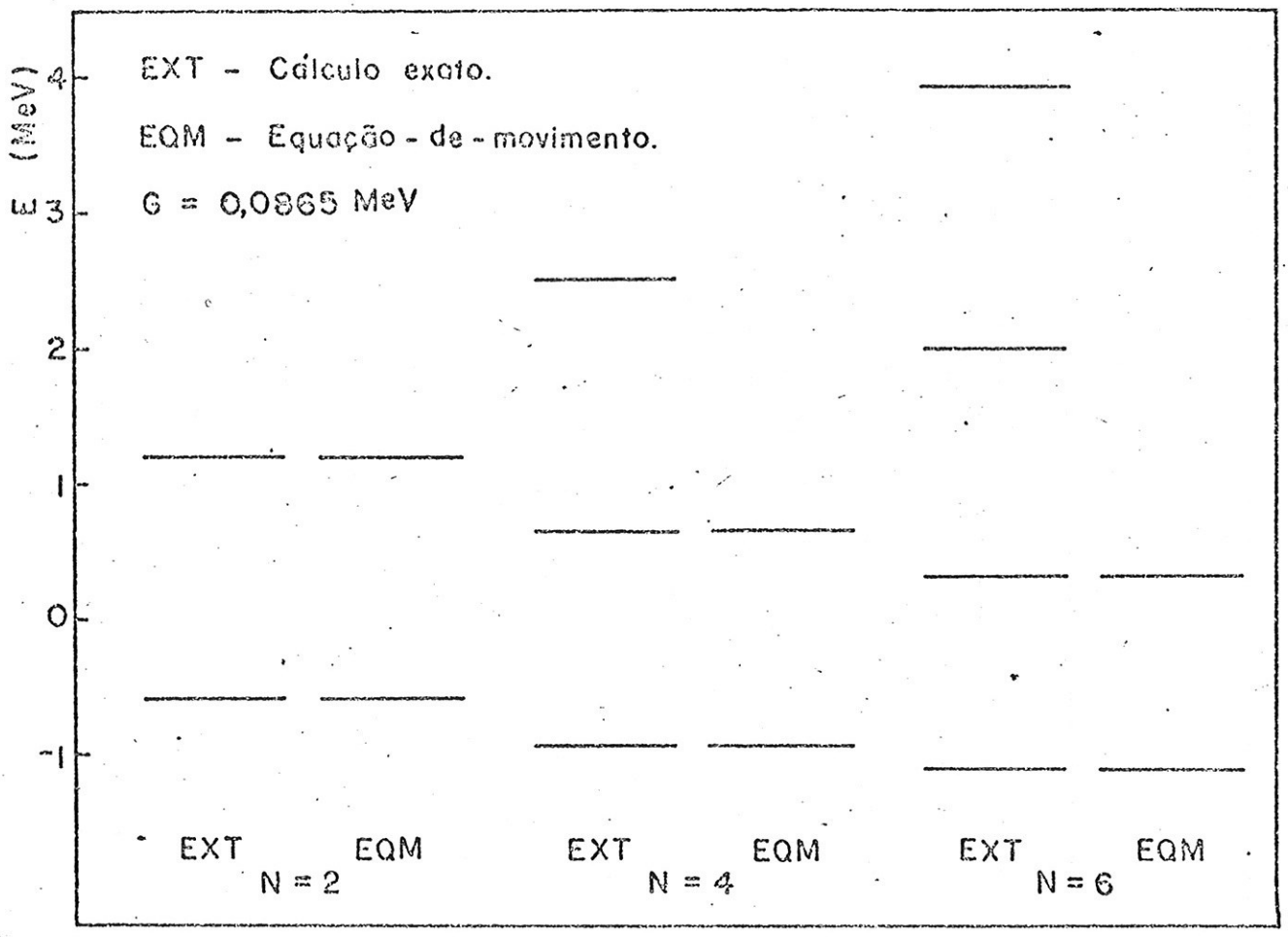


Figura 1 - Espectros completos de senioridade nula para N partículas nos orbitais 1g 9/2 e 0i 11/2 com emparelhamento. (Energias absolutas).

FIGURA 2

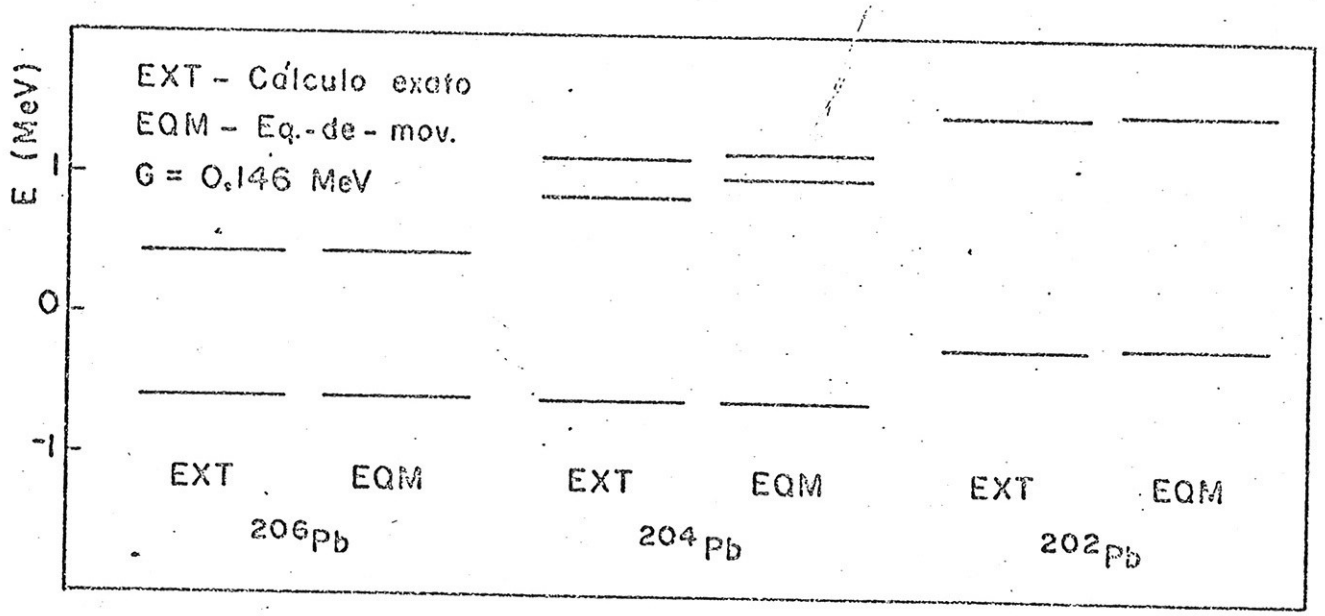


Figura 2 - Baixo espectro de senioridade nula para o ^{206,204,202}Pb com emparelhamento. (Energias absolutas). O cálculo exato é de Richardson e Sherman (RiS 64).

FIGURA 3

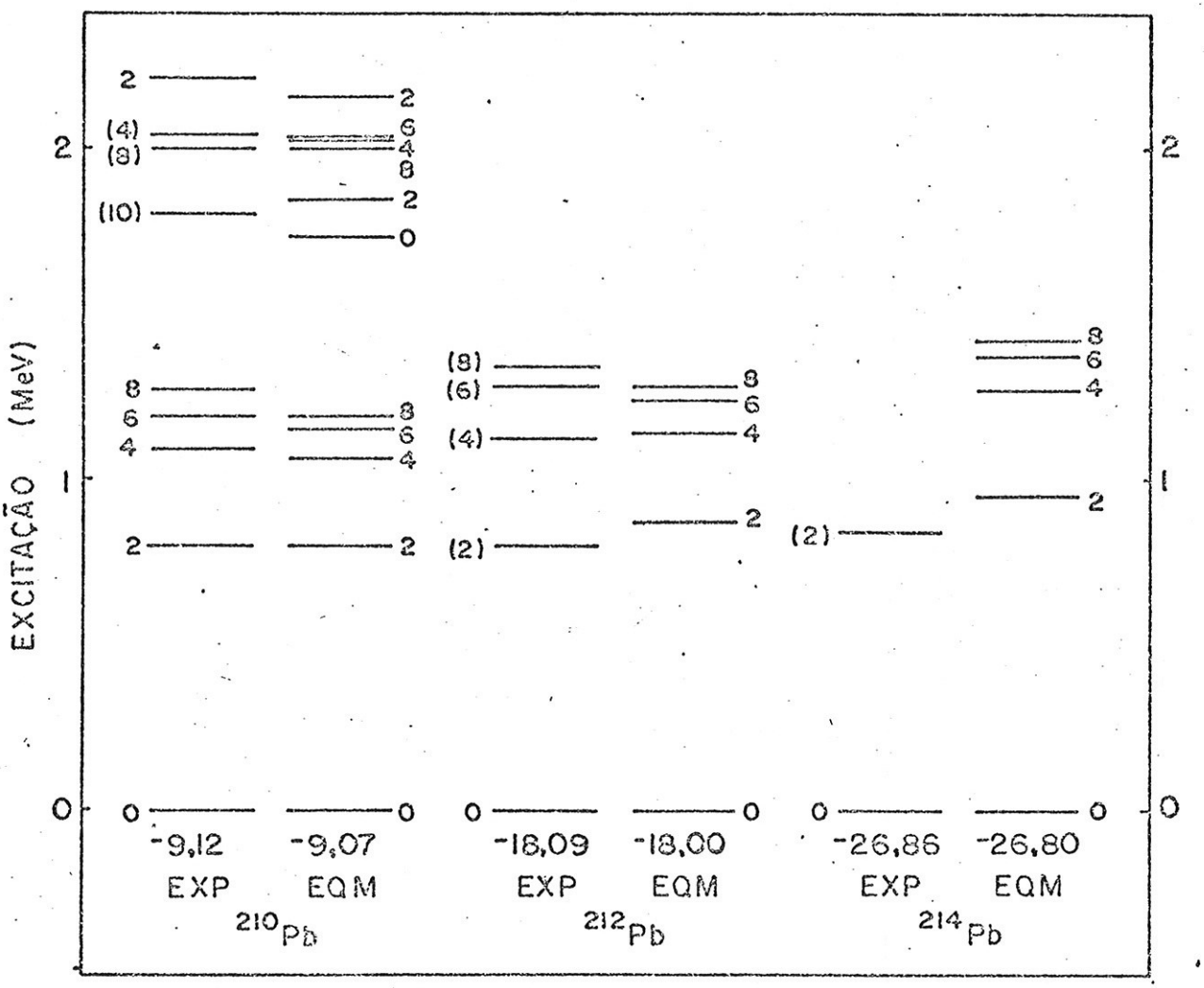


Figura 3 - Espectros de excitação observados (EXP) e calculados com as equações de movimento (EQM) para o ^{210,212,214}Pb. Todos os níveis conhecidos com paridade positiva, abaixo do mais alto desenhado em cada espectro, foram incluídos. Os valores de J entre parênteses são tentativos. Só foram calculados os níveis com $J^{\pi} = 0^+, 2^+, 4^+, 6^+$ e 8^+. Abaixo de cada espectro está, em MeV, a energia do estado fundamental em relação à do ^{208}Pb.

FIGURA 4

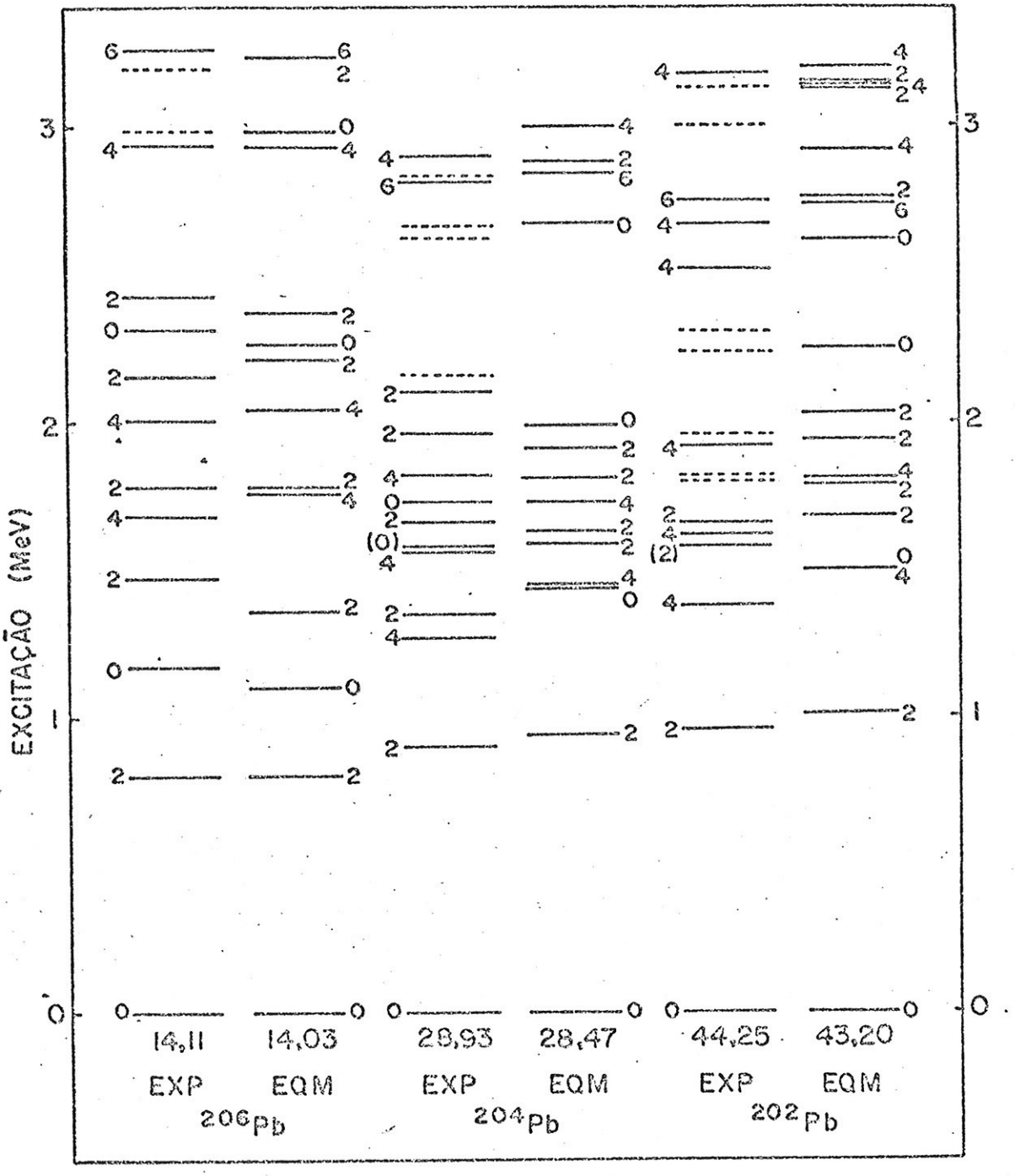


Figura 4 - Espectros de excitação do ^{206,204,202}Pb observados (EXP) e calculados com as equações de movimento (EQM). Todos os níveis com $J^{\pi} = 0^+$, 2^+, 4^+ e 6^+ abaixo do mais alto incluído em cada espectro estão desenhados em linha cheia e os com J^{π} desconhecido, em linha interrompida. Valores de J entre parênteses são tentativos. Abaixo de cada espectro está, em MeV, a energia do estado fundamental em relação à do ^{208}Pb.

FIGURA 5

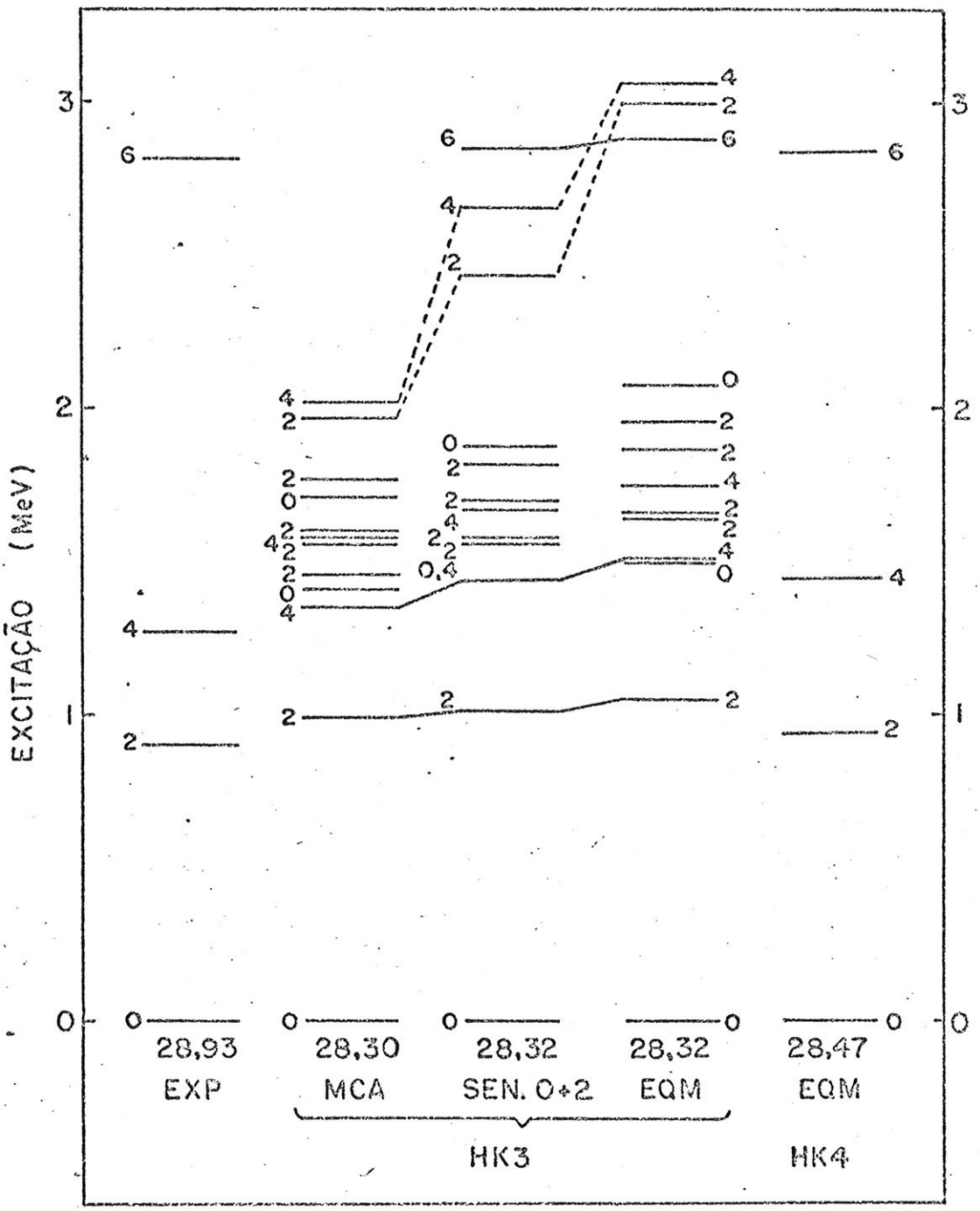


Figura 5 - Comparação dos espectros de excitação do ^{204}Pb calculados com o modelo de camadas completo (MCA) e com truncamento de senioridade (SEN. 0+2), por McGrory e Kuo (McK 75), e pelas equações de movimento (EQM) usando a mesma interação - HK3. As posições dos níveis 0_1^+, 2_1^+, 4_1^+ e 6_1^+ observados (EXP) e calculados pelas equações de movimento com a interação HK4 estão indicadas. Abaixo de cada espectro está, em MeV, a energia do estado fundamental em relação à do ^{208}Pb.

FIGURA 6

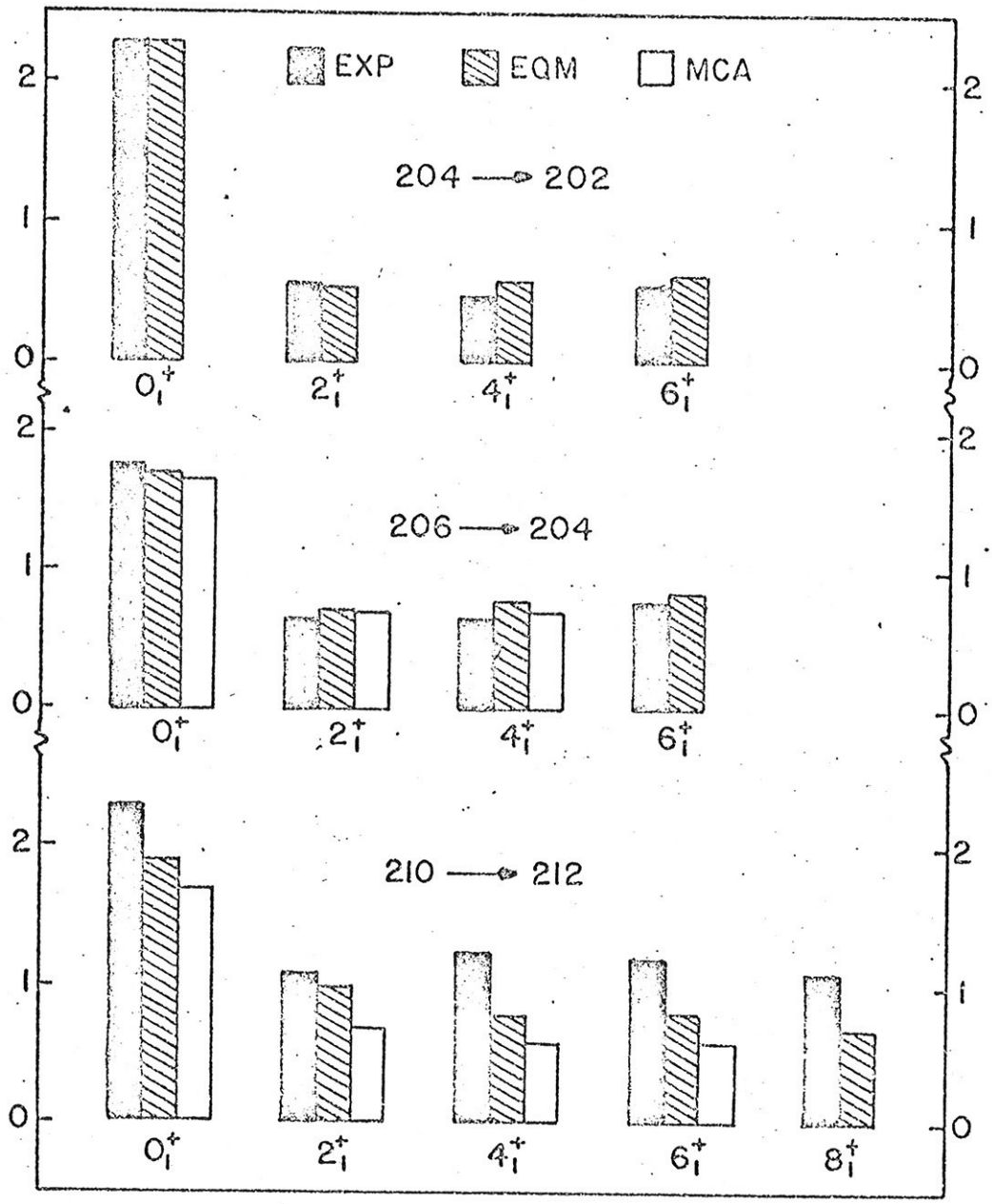


Figura 6 - Seções de choque relativas para transições (p,t) e (t,p) intensas, entre isótopos pares do chumbo, medidas (EXP) por (Lan 77) e (Ell + 71) e calculadas com o modelo de camadas (MCA) por(McK 75) e com as equações de movimento (EQM).

R E F E R Ê N C I A S

REFERÊNCIAS

And 58 P.W.Anderson - Phys.Rev. 112 (1958) 1900

Bae+73 H.W.Baer, J.J.Kraushaar, C.E.Moss, N.S.P.King, R.E. L.Green, P.D.Kunz e E.Rost - Ann. of Phys. 76 (1973) 437

Bar 60 M.Baranger - Phys.Rev. 120 (1960) 957

BeB 71 D.R.Bès e R.A.Broglia - Phys.Rev. C3 (1971) 2349

BeG 69 F.D.Becchetti Jr. e G.W.Greenlees - Phys.Rev. 182 (1969) 1190

BeZ 62 S.T.Beliaev e V.G.Zelevinsky - Nucl.Phys. 39 (1962) 582

Boh 68 A.Bohr - in Proceedings of International Symposium on Nuclear Structure, Dubna, 1968 (IAEA, Viena,1968) 179

Boh+68 O.Bohigas, C.Quesne e R.Arvieu - Phys.Lett. 26B (1968) 562

BrG 77 P.J.Brussard e P.W.M.Glaudemans - Shell-Model Applications in Nuclear Spectroscopy (North-Holland, Amsterdam, 1977)

BrM 67 T.A.Brody e M.Moshinsky - Tables of Transformation Brackets (Gordon and Breach, Nova Iorque, 1967)

Bro+74 R.A.Broglia, D.R.Bès e B.S.Nilsson - Phys.Lett. 50B (1974) 213

DaK 64 G.Do Dang e A.Klein - Phys.Rev. 133 (1964) B257

Dre+67 R.M.Dreizler, A.Klein, C.S.Wu e G.Do Dang - Phys. Rev. 156 (1967) 1167

Ell+71 C.Ellegaard, P.D.Barnes e E.R.Flynn - Nucl.Phys. A170 (1971) 209

Fly+69 E.R.Flynn, D.D.Armstrong, J.G.Beery e A.G.Blair - Phys.Rev. 182 (1969) 1113

Fly+72 E.R.Flynn, G.J.Igo, R.A.Broglia, S.Landowne, V.Paar e B.Nilsson - Nucl.Phys. A195 (1972) 97

FRa 59 U.Fano e G.Racah - Irreducible Tensorial Sets (Academic Press, Nova Iorque, 1959)

Fre 66 J.B.French - in Proc.of the Int.School of Phys."Enrico Fermi" 36, Varenna, 1965 - Many Body Description of Nuclear Structure and Reactions (Academic Press, Nova Iorque, 1966) 278

Fre+69 J.B.French, E.C.Halbert, J.B.McGrory e S.S.M.Wong - in Advances in Nuclear Physics, vol.3 (Plenum Press, Nova Iorque, 1969) 193

GhG 72 M.K.Ghosh e A.Goswami - Phys.Rev. C5 (1972) 1581

GoN 70 A.Goswami e O.Nalcioğlu - Phys.Rev. C2 (1970) 1573

HaJ 62 T.Hamada e I.D.Johnston - Nucl.Phys. 34 (1962) 382

HeK 72 G.H.Herling e T.T.S.Kuo - Nucl.Phys. A181 (1972)113

KeK 63 A.K.Kerman e A.Klein - Phys.Rev. 132 (1963) 1326

KHe 71 T.T.S.Kuo e G.H.Herling - NRL memorandum report 2258 (Naval Research Laboratory, Washington, 1971)

KuB 66 T.T.S.Kuo e G.E.Brown - Nucl.Phys.85 (1966) 40

KuB 67 G.E.Brown e T.T.S.Kuo - Nucl.Phys. A92 (1967)481

KuB 68 T.T.S.Kuo e G.E.Brown - Nucl.Phys. A114 (1968) 241

Kuo 74 T.T.S.Kuo - Ann.Rev.Nucl.Sci. 24 (1974) 101

Lan 77 W.A.Lanford - Phys.Rev. C16 (1977) 988

Mar 79 M.J.Martin - Nuclear Data Sheets 27 (1979) 637

Mar+64 T.Marumori, M.Yamamura, A.Tokunaga e K.Takada - Prog.Theor.Phys. 32 (1964) 726

MaT 73 C.W.Ma e W.W.True - Phys.Rev. C8 (1973) 2313

McK 75 J.B.McGrory e T.T.S.Kuo - Nucl.Phys. A247 (1975)283

Mes 66 A.Messiah - Quantum Mechanics (Wiley, Nova Iorque, 1966)

Mos 70 S.A.Moszkowski - Phys.Rev. C2 (1970) 402

MYT 64 T.Marumori, M.Yamamura e A.Tokunaga - Prog.Theor. Phys. 31 (1964) 1009

PaR 68 J.C.Parikh e D.J.Rowe - Phys.Rev. 175 (1968) 1293

RiS 64 R.W.Richardson e N.Sherman - Nucl.Phys. 52 (1964) 253

Row 68 D.J.Rowe - Rev.Mod.Phys. 40 (1968) 153

RoW 70 D.J.Rowe e S.S.M.Wong - Nucl.Phys. A153 (1970) 561

Row 70 D.J.Rowe - Nuclear Collective Motion (Methuen, Londres, 1970)

Row+75 D.J.Rowe e C.Ngo-Trong - Rev.Mod.Phys. 47 (1975)471

RyG 63 I.M.Ryshik e I.S.Gradstein - Summen-,Produkt-und Integral-Tafeln (VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlim, 1963)

Saw 57 K.Sawada - Phys.Rev. 106 (1957) 372

Saw 61 J.Sawicki - Nucl.Phys. 23 (1961) 285

Sch 78 M.R.Schmorak - Nuclear Data Sheets 25 (1978) 675

Sch 79 M.R.Schmorak - Nuclear Data Sheets 27 (1979) 581

ShT 63 A.de Shalit e I.Talmi - Nuclear Shell Theory (Academic Press, Nova Iorque, 1963)

Tal 62 I.Talmi - Rev.Mod.Phys. 34 (1962) 704

Tot 77 K.S.Toth - Nuclear Data Sheets 21 (1977) 437

Tru 68 W.W.True - Phys.Rev. 168 (1968) 1388

Tru+58 W.W.True e K.W.Ford - Phys.Rev. 109 (1958) 1675

Tru+71 W.W.True, C.W.Ma e W.T.Pinkston - Phys.Rev. C3 (1971) 2421

UlR 69 N.Ullah e D.J.Rowe - Phys.Rev. 188 (1969) 1640

VaB 71 D.Vautherin e D.M.Brink - Phys.Rev. C5 (1971) 626

VaG 71 J.Vary e J.N.Ginocchio - Nucl.Phys. A166 (1971) 479

Val 61 J.G.Valatin - Phys.Rev. 122 (1961) 1012

Web 79 M.P.Webb - Nuclear Data Sheets 26 (1979) 145