

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA

DESCRICAÇÃO MICROSCÓPICA DO ESPALHAMENTO ${}^3\text{He}-\alpha$
COM INTERAÇÃO DEPENDENTE DA DENSIDADE



MARILENA MATIKO WATANABE DE MORAES

SBI-IFUSP



305M810T0999

TESE DE DOUTORAMENTO APRESENTADA
NO INSTITUTO DE FÍSICA DA UNIVER-

SIDADE DE SÃO PAULO

ORIENTADOR: PROF. DR. ANTONIO FERNANDO RIBEIRO DE TOLEDO PIZA

Defesa em 4/9/87

1987

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

539.758

M 824d



FICHA CATALOGRÁFICA

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

Moraes, Marilena Matiko Watanabe de
Descrição microscópica do espalhamento ${}^3\text{He}-\alpha$ com
interação dependente da densidade. São Paulo, 1987.

OJDA Tese (Doutorado) - Universidade de São Paulo. Instituto de Física. Departamento de Física Matemática.
Área de Concentração: Física Nuclear.

Orientador: Prof. Dr. Antonio Fernando Ribeiro de Toledo Piza

Unitermos: 1. Espalhamento nuclear; 2. Método de coordenadas geradoras; 3. Método de grupo ressonante;
4. Interacão de Skyrme.

USP/IF/SBI - 21/87

Aos meus pais e
Carlos, André e Marcos

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

Ao Prof. Piza pela orientação que enriqueceu este trabalho com sugestões e discussões esclarecedoras, pelo apoio nos momentos críticos e pela confiança depositada.

Ao Diógenes pelo interesse e incentivo constante.

Ao Rafael de Haro, Kazuo Ueta, Maria Lúcia dos Santos, Jason Gallas, Kiyomi Koide, Manoel Robilotta e Marcelo Tragtenberg que me auxiliaram de diferentes formas.

Aos amigos que me incentivaram a concluir este trabalho: Mazé, Fred e Ricardo.

À Rita pela eficiência e boa vontade.

Aos colegas do Departamento de Física e ao pessoal do Suporte e Operações do NPD da Universidade Federal de Santa Catarina que me ofereceram condições para a realização deste trabalho.

Ao Carlos pela datilografia e ao Elpídio pelos gráficos.

À FAPESP pelo suporte financeiro no início deste trabalho.

Ao Juca pelo estímulo constante em todas as fases deste trabalho, pelos gráficos e pela revisão dos cálculos e do texto final.

RESUMO

O espalhamento elástico de um sistema nuclear leve, $^3\text{He}-\alpha$, é analisado dentro do formalismo do Método de Coordenadas Geradoras usando o procedimento formulado por Piza e Passos (PP 78). A mesma técnica numérica é adotada para descrever os estados ligados e propriedades de espalhamento. As defasagens das ondas parciais $l = 0,1,2$ e 3 e as energias dos estados ligados do ^7Be são calculados utilizando interações dependentes da densidade Skyrme III e IV. Os resultados são confrontados com os dados experimentais e é proposta uma prescrição para a escolha dos parâmetros do potencial de Skyrme que melhora a descrição desse sistema.

ABSTRACT

The elastic scattering of a light nuclear system, $^3\text{He}-\alpha$, is analised in the framework of the Generator Coordinate Method (GCM) using the approach of Piza and Passos (PP 78). The same numerical technique is adopted to describe the bound states and scattering properties. A density dependent interaction (Skyrme III and IV) is used to calculate the phase-shifts for partial waves $l = 0, 1, 2$ and 3 , and the bound states energies of ^7Be . A new set of parameter for the Skyrme force is proposed in order to improve the agreement with experimental data.

ÍNDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO II - MÉTODO DO GRUPO RESSONANTE	3
II.A - INTRODUÇÃO	3
II.B - FORMALISMO	4
II.C - EQUAÇÕES DE AUTO VALORES PARA O OPERADOR A(R, R')	11
II.D - TESTE DAS SOLUÇÕES REDUNDANTES	12
II.E - SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DO MGR	14
CAPÍTULO III - MÉTODO DE COORDENADAS GERADORAS	17
III.A - INTRODUÇÃO	17
III.B - FORMULAÇÃO DO MCG	17
III.C - MCG DISCRETIZADO	22
III.D - SUB-ESPAÇO COLETIVO NO MCG	25
CAPÍTULO IV - MCG PARA ESPALHAMENTO NÚCLEO-NÚCLEO	30
IV.A - INTRODUÇÃO	30
IV.B - ESPALHAMENTO ELÁSTICO NÚCLEO-NÚCLEO ..	31
IV.C - DIAGONALIZAÇÃO COMPLETA DO $N(\alpha, \alpha')$..	37
IV.D - SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DO MCG PARA ESPALHAMENTO ELÁSTICO	39
IV.E - MCG PARA DOIS FRAGMENTOS COM PARÂMETROS DO OSCILADOR DIFERENTE	42
CAPÍTULO V - ESPALHAMENTO $^3\text{He}-\alpha$	46
V.A - INTRODUÇÃO	46
V.B - HAMILTONIANA COLETIVA	48
V.C - MÉTODO DE FREDHOLM PARA CÁLCULO DAS DEFASAGENS E ESTADOS LIGADOS	55
V.D - RESULTADOS PARA OS POTENCIAIS DE SKYRME III E IV	61
V.E - PARÂMETROS DE SKYRME PARA ESPALHAMENTO $^3\text{He}-\alpha$	68
CAPÍTULO VI - CONCLUSÃO	72
APÊNDICES	76
REFERÊNCIAS	92

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

Ao lado das teorias fenomenológicas, como o modelo óptico [Ho 63], que, aliadas à simplicidade do seu formalismo, explicam uma ampla gama de fenômenos nucleares envolvendo reações nucleares de íons pesados, temos duas teorias microscópicas utilizadas no estudo de espalhamento de núcleos pesados leves: o Método de Grupo Ressonante [Wh 37] e o Método de Coordenadas Geradoras [HW 53, GW 57].

O Método de Grupo Ressonante (MGR) e o Método de Coordenadas Geradoras (MCG) são duas descrições microscópicas de reações nucleares que levam em conta correlações de longo alcance que se manifestam sob a forma de aglomerados de nucleons. O MCG é essencialmente equivalente ao MGR no estudo do espalhamento e reações nucleares, mas ele é também particularmente bem adaptado para descrever movimentos coletivos de um único sistema nuclear, tais como vibrações e rotações. As principais características desses dois formalismos são: a inclusão completa do Princípio de Pauli, o tratamento exato do movimento do centro de massa e a descrição unificada do problema de estado ligado e do espalhamento de dois fragmentos. Devido à utilização das funções de onda completamente antissimétricas, ambas as teorias levam a cálculos laboriosos de operações integrais (núcleos) para a energia, o que restringe o universo dos sistemas que podem ser estudados com elas (fragmentos com $A \leq 40$). Para tornar factível o estudo de sistemas mais pesados, muito esforço tem sido dispendido para incluir o efeito de antissimetriação de uma forma aproximada [Sa 69] e

para obter o potencial efetivo núcleo-núcleo (local) [FC 77].

Neste trabalho nos limitaremos ao estudo de um sistema leve de sete partículas, com o princípio de Pauli tratado exatamente (com exceção do termo Coulombiano), utilizando o MCG dentro do formalismo de Piza-Passos [PP 78]. Um dos problemas existentes no estudo de reações nucleares que envolvem sistemas desse tipo com vários canais abertos é a escolha de uma interação nucleon-nucleon efetiva que descreva adequadamente também a energia de ligação dos vários fragmentos envolvidos. De fato, isto é essencial para reproduzir corretamente os vários limiares. O sucesso obtido pela interação de Skyrme no cálculo de energia de ligação e do raio de núcleos nos cálculos autoconsistentes e nas descrições de movimentos coletivos dentro do contexto de MCG, nos estimulou a investigar a adequabilidade dessa interação também para um problema de espalhamento.

No Capítulo II e III faremos uma breve revisão do MGR e MCG respectivamente. No Capítulo IV, trataremos o MCG adaptado ao estudo do espalhamento elástico. No Capítulo V, mostraremos as defasagens do espalhamento elástico $^3\text{He}-\alpha$, calculados com o potencial de Skyrme III e IV. Apresentaremos também uma prescrição para a escolha de um novo conjunto de parâmetros que descrevem satisfatoriamente os dados experimentais desse sistema. No Capítulo VI apresentaremos as conclusões deste trabalho.

CAPÍTULO II

MÉTODO DO GRUPO RESSONANTE

II.A - INTRODUÇÃO

O Método do Grupo Ressonante (MGR) foi formulado em 1937 por Wheeler [Wh 37] a partir da idéia de que a descrição dos núcleos compostos deve incluir a possibilidade da existência de sub-grupos tais como as partículas α , dineutrons, etc... No entanto, como consequência da antissimetriação total da função de onda, tais sub-grupos não teriam existência autônoma dentro do núcleo, isto é, os nucleons que constituem um sub-grupo estariam continuamente se trocando com os nucleons de outros sub-grupos.

A troca de neutrons e protons entre os vários agrupamentos daria origem à interação entre os sub-grupos que os manteria ligados.

O método é particularmente adequado para estudar espllhamento nuclear em que pelo menos dois sub-grupos (projétil e o alvo) interagem. A vantagem desse método é que a forma adotada para a função de onda tentativa permite uma boa descrição tanto dos estados fundamentais como dos primeiros estados excitados. No entanto, o aumento da energia de excitação faz com que a descrição do núcleo em termos de sub-grupos se torne inviável já que o tempo característico da difusão (tempo necessário para um dado sub-grupo trocar um nucleon com um outro sub-grupo) se torna cada vez menor em relação ao período de vibração do núcleo (veja a discussão na referência [Wh 37]).

Embora os resultados obtidos por esse Método sejam satisfatórios, no que diz respeito à obtenção das defasagens e do espectro de baixa energia do núcleo composto, a sua aplicação tem se limitado a núcleos leves devido à complexidade da função de onda tentativa utilizada no cálculo variacional que leva a cálculos de operadores de energia bastante complicados (envolvem integrais com coordenadas internas e relativas dos sub-grupos).

No entanto a conexão que existe entre esse método e o Método de Coordenadas Geradoras, permitiu o desenvolvimento de técnicas, tais como:

- a) técnica de coordenada geradora complexa [Ho '72] ou técnica de função delta [SW 72].
- b) transformada de Gauss inversa [Fr 84].
- c) expansão dos operadores de RGM nas funções de onda do oscilador harmônico do movimento relativo [MKF 74] que viabilizaram a sua utilização para cálculo de espalhamento elástico envolvendo núcleos duplamente mágicos até $A = 40$.

II.B - FORMALISMO

No MGR com um canal aberto, um sistema formado por dois fragmentos nucleares 1 e 2, com n^os de massa A_1 e A_2 é descrito por uma função de onda de muitos corpos completamente antisimétrica

$$\Psi = \mathcal{A} \left\{ \phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) g(r) \phi(R_{cn}) \right\} \quad (\text{II-1})$$

As funções ϕ_1 e ϕ_2 são funções de onda internas dos dois fragmentos com coordenadas intrínsecas ξ_1 e ξ_2 respectivamente; $\phi(R_{CM})$ é a função de onda normalizada do centro de massa do sistema $A_1 + A_2$. A função de onda do movimento relativo $g(r)$ depende da distância que separa os centros de massa de A_1 e A_2

$$r = \frac{1}{A_1} \sum_{i \in 1} r_i - \frac{1}{A_2} \sum_{i \in 2} r_i \quad (\text{II-2})$$

O operador de antissimetriação $\mathcal{A} = \sum (-1)^{p_p}$ leva em conta todas as possibilidades de troca dos nucleons e atua sobre as coordenadas ξ_1 , ξ_2 e r .

A equação (II-1) pode ser reescrita como

$$\psi = \int dR g(R) \mathcal{A} \{ \phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) \delta(r - R) \phi(R_{CM}) \} \quad (\text{II-3})$$

onde R é um parâmetro, sobre o qual o operador de antissimetriação não atua.

A equação do MGR para a função onda relativa g , na representação de parâmetro R , pode ser obtida através do princípio variacional

$$\delta E = 0 \quad \text{onde} \quad E = \langle \psi | \mathcal{H} | \psi \rangle \quad (\text{II-4})$$

e \mathcal{H} é a hamiltoniana microscópica do sistema de muitos corpos

$$\mathcal{H} = \sum_i^A t_i + \sum_{i < j} V_{ij} \quad (\text{II-5})$$

A equação de movimento para a função g é da forma

$$\int [H(R, R') - E_t A(R, R')] g(R') dR' = 0 \quad (\text{II-6})$$

onde

E_t é a energia total do sistema e é igual a soma das energias internas, $E_1 + E_2$, dos fragmentos da energia relativa, E , dos dois fragmentos no sistema de centro de massa e da energia cinética do centro de massa, E_{CM} .

$$E_t = E_1 + E_2 + E + E_{CM}$$

Os operadores $H(R, R')$ e $A(R, R')$ são definidos como

$$\begin{aligned} H(R, R') & \\ A(R, R') & \end{aligned} = \left\langle \phi(R_{CM}) \phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) \delta(r-R) \right| \mathcal{H} \left| \begin{array}{l} \phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) \delta(r-R') \phi(R_{CM}) \end{array} \right\rangle \quad (\text{II-7})$$

onde o símbolo $\langle \rangle$ indica a integração em todas as coordenadas espaciais e a soma sobre todos os spins e isospins.

Esses operadores são hermitianos e usando a identidade

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}' \mathcal{A}_1 \mathcal{A}_2 \quad (\text{II-8})$$

onde \mathcal{A}_1 e \mathcal{A}_2 são operadores de antissimetriação para os nucleons dos fragmentos 1 e 2 respectivamente, e \mathcal{A}' é o operador de antissimetriação que troca os nucleons pertencentes a fragmentos diferentes; o operador $A(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ pode ser escrito como

$$A(\mathbf{R}, \mathbf{R}') =$$

$$= \langle \phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) \delta(r-R) \phi(R_{cm}) | \mathcal{A}' \{ \mathcal{A}_1 \phi_1(\xi_1) \mathcal{A}_2 \phi_2(\xi_2) \delta(r'-R') \phi(R'_{cm}) \} \rangle \quad (\text{II-9})$$

O operador $A(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ pode ser escrito como soma de duas contribuições: o termo direto $A_D(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ que é de longo alcance e o termo de troca $A_T(\mathbf{R}, \mathbf{R}')$ que é de curto alcance

$$A(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = A_D(\mathbf{R}, \mathbf{R}') + A_T(\mathbf{R}, \mathbf{R}') \quad (\text{II-10})$$

onde

$$A_T(R, R') = \langle \phi_1(z_1) \phi_2(z_2) \delta(r - R) \phi(r_{cm}) | \not{A}'' \{ A_1 \phi_1(z_1) \not{A}_2 \phi_2(z_2) \delta(r - R') \phi(r_{cm}) \} \rangle \quad (II-11)$$

com \not{A}'' = operador de antissimetriação atuando sobre nucleons pertencentes a fragmentos diferentes, excluída a possibilidade de troca de um fragmento por outro

$$A_D(R, R') = \begin{cases} \delta(r - R') & \text{para dois fragmentos distinguíveis} \\ \frac{1}{2} [\delta(r - R') \pm \delta(r + R')] & \text{para dois fragmentos idênticos} \end{cases} \quad (II-12)$$

O sinal + se aplica para fragmentos com nº par de nucleons (estatística de Bose) e o sinal - para fragmentos com nº ímpar de nucleons (estatística de Fermi).

Analogamente podemos separar $H(R, R')$ em duas partes:

$$H(R, R') = H_D(R, R') + H_T(R, R') \quad (II-13)$$

$$H_D(R, R') = \langle \phi_1(z_1) \phi_2(z_2) \delta(r-R) \phi(R_{cm}) | \mathcal{H} | \phi_1(z_1) \phi_2(z_2) \delta(r-R') \phi(R_{cm}) \rangle \quad (II-14)$$

$$H_T(R, R') = \langle \phi_1(z_1) \phi_2(z_2) \delta(r-R) \phi(R_{cm}) | \mathcal{H} | \phi_1(z_1) \phi_2(z_2) \delta(r-R') \phi(R_{cm}) \rangle \quad (II-15)$$

A hamiltoniana \mathcal{H} do sistema pode ser escrita como

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 + \mathcal{H}_2 + T_{cm} + \mathcal{H}' \quad (II-16)$$

onde \mathcal{H}_1 e \mathcal{H}_2 são as hamiltonianas internas dos fragmentos, de modo que

$$E_i = \langle \phi_1 \phi_2 \delta(r-R) \phi_{cm} | \mathcal{H}_i | \phi_1 \phi_2 \delta(r-R') \phi_{cm} \rangle \quad (II-17)$$

$$i = 1, 2$$

$$T_{cm} = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla_{R_{cm}}^2 \quad \text{onde } M = \text{massa total do sistema} \quad (II-18)$$

$$\mathcal{H}' = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_r^2 + V' \quad (II-19)$$

onde μ é a massa reduzida dos fragmentos 1 e 2, e

$$V' = \sum_{\substack{i \in 1 \\ j \in 2}} V_{ij} \quad (\text{II-20})$$

O potencial nucleon-nucleon V_{ij} contém em geral, um termo não-local na forma de um operador de troca de coordenadas espaciais P_{ij}^r que no MGR que utiliza funções de onda totalmente antissimetrizadas, pode ser substituído pelo produto dos operadores de troca de spin, P_{ij}^σ , e isospin, P_{ij}^τ , com sinal negativo, isto é,

$$P_{ij}^r = - P_{ij}^\sigma P_{ij}^\tau \quad (\text{II-21})$$

Com essa substituição podemos definir um potencial que é local em coordenadas espaciais, $V_D(\mathbf{R})$, da seguinte forma:

$$V_D(\mathbf{R}) A_D(\mathbf{R}, \mathbf{R}') = \langle \phi_1 \phi_2 \phi_{cm} | V' | \phi_1 \phi_2 \phi_{cm} \rangle \quad (\text{II-22})$$

Utilizando as equações (II-7) - (II-22) podemos reescrever a equação (II-6) como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla_{\mathbf{R}}^2 + V_D(\mathbf{R}) - E \right] g(\mathbf{R}) + \int K(\mathbf{R}, \mathbf{R}') g(\mathbf{R}') d\mathbf{R}' = 0 \quad (\text{II-23})$$

onde

$$K(R, R') = H_T(R, R') - E_T A_T(R, R') \quad (\text{II-24})$$

II.C - EQUAÇÃO DE AUTO VALORES PARA O OPERADOR A(R, R')

Para funções de onda intrínsecas arbitrárias no M.G.R., $A_T(R, R')$ é um operador de Hilbert-Schmidt [Sa 68, Fr 81] ao qual se pode associar a equação de auto-valores:

$$\int A_T(R, R') \varphi_n(R') dR' = \gamma_n \varphi_n(R) \quad (\text{II-25})$$

Os auto-valores γ_N tem zero como único ponto limite possível. O operador $A(R, R')$ definido na equação (II-7) tem as mesmas auto-funções que o operador $A_T(R, R')$:

$$\int A(R, R') \varphi_n(R') dR' = \mu_n \varphi_n(R) \quad (\text{II-26})$$

onde $\mu_N = 1 - \gamma_N$.

Como $A(R, R')$ é um operador positivo definido, temos:

$$\mu_N > 0 \quad \text{o que implica em} \quad \gamma_N \leq 1 \quad (\text{II-27})$$

Quando as funções de onda intrínseca ϕ_1 e ϕ_2 são funções de onda do oscilador harmônico com a mesma freqüência ω e parâmetro $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$, onde m é a massa do nucleon, as auto-funções ψ_N são funções de onda do oscilador harmônico com freqüência ω e parâmetro [Za 71, HS 73]

$$B = b \left(\frac{A_1 + A_2}{A_1 A_2} \right)^{1/2} \quad (\text{II-28})$$

Nesse caso (funções de onda do oscilador com a mesma freqüência ω) temos auto-estados do operador $A(\mathbb{R}, \mathbb{R}')$ com auto-valor exatamente igual a zero, que geram estados do sistema de muitos corpos com norma nula [Sa 69]. As soluções da eq. do MGR que geram estados do sistema de muitos corpos com norma nula são chamadas de estados proibidos ou redundantes. Esses estados correspondem a estados proibidos pelo princípio de exclusão de Pauli.

II.D - TESTE DAS SOLUÇÕES REDUNDANTES

Os estados redundantes podem ser utilizados para verificar a exatidão dos cálculos dos operadores do MGR [HMU 54 e TSW 63] no caso em que os dois fragmentos são descritos por funções de onda do oscilador harmônico no estado fundamental e com o mesmo parâmetro do oscilador.

Nesse caso, existem soluções $g_{\text{red}}(\mathbf{r})$ da equação (II-23), para as quais a função de onda (II-1) se anula

$$\psi_{\text{red}} = \mathcal{A} [\phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) g_{\text{red}}(r) \phi_{cm}] = 0 \quad (\text{II-29})$$

de modo que devemos obter também

$$\langle \phi_1 \phi_2 \delta(r - R) \phi_{cm} | \mathcal{A} [\phi_1 \phi_2 g_{\text{red}}(r) \phi_{cm}] \rangle = 0 \quad (\text{II-30})$$

$$\langle \phi_1 \phi_2 \delta(r - R) \phi_{cm} | \mathcal{H} | \mathcal{A} [\phi_1 \phi_2 g_{\text{red}}(r) \phi_{cm}] \rangle = 0 \quad (\text{II-31})$$

Utilizando a equação (II-7), as equações (II-30) e (II-31) podem ser reescritas como

$$\int A(R, R') g_{\text{red}}(R') dR' = 0 \quad (\text{II-32})$$

que é equivalente à equação (II-26) com $\mu_N = 0$ e

$$\int H(R, R') g_{\text{red}}(R') dR' = 0 \quad (\text{II-33})$$

Portanto a exatidão dos cálculos dos operadores pode ser testada contando o nº de auto-valores nulos desses operadores que deve ser comparado com o resultado da análise dos estados proibidos pelo princípio de Pauli do sistema considerado.

Por exemplo, para os sistemas que envolvem fragmentos nos estados $(1S)^i$, onde $i = 1, 2, 3, 4$ [Wo 75], considera-se a configuração de mais baixa energia do sistema de A nucleons, compatível com o Princípio de Pauli e calcula-se o nº de quanta do oscilador nessa configuração que é dado por

$$(N.Q) = \sum_{i=1}^A (2n_i + l_i) \quad (\text{II-34})$$

onde

n_i = nº de nós da função de onda radial (excluindo o infinito)

l_i = momento angular do $i^{\text{ésimo}}$ nucleon.

Como o nº de quanta de cada um dos fragmentos é zero, pois estão no estado $(1S)$, o grau de liberdade relativo deve contribuir com $(N.Q)_{\text{rel}} = 2n + l \geq N.Q$ para não violar o Princípio de Exclusão de Pauli. Os estados g_{rel} com $(N.Q)_{\text{rel}} < N.Q$ são os estados redundantes.

Para núcleos duplamente mágicos, com mais de 4 nucleons em cada um dos fragmentos, o cálculo dos estados redundantes é um pouco mais elaborado, veja a referência [Fr 81].

III.E - SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DO MGR

Considerando uma dinâmica nuclear que inclua interação de spin-órbita para os fragmentos, a decomposição em ondas parciais da equação (II-23) é feita, utilizando as seguintes expansões

$$g(\mathbf{R}) = \frac{1}{R} \sum_{\substack{\mathbf{J} \in S \\ M}} g_{\mathbf{J}\ell}(R) Y_{\mathbf{J}\ell}^M(\hat{\mathbf{R}}) \quad (\text{II-35})$$

$$K(R, R') = \frac{1}{RR'} \sum_{\substack{\mathbf{J} \in S \\ M}} Y_{\mathbf{J}\ell}^M(\hat{\mathbf{R}}) k_{\mathbf{J}\ell}(R, R') Y_{\mathbf{J}\ell}^M(\hat{\mathbf{R}'})^* \quad (\text{II-36})$$

onde a função $Y_{\mathbf{J}\ell}^M(\hat{\mathbf{R}})$ depende dos ângulos do vetor $\hat{\mathbf{R}}$; do spin total S do sistema, do momento angular orbital relativo ℓ , e do momento angular total J com componente M . Ela é da forma:

$$Y_{\mathbf{J}\ell}^M(\hat{\mathbf{R}}) = \sum_{m_s m_\ell} \langle l s m_\ell m_s | JM \rangle Y_{lm_\ell}(\hat{\mathbf{R}}) \chi_{sm_s} \quad (\text{II-37})$$

onde $\langle l s m_\ell m_s | JM \rangle$ é um coeficiente de Clebsch-Gordan, $Y_{lm_\ell}(\hat{\mathbf{R}})$ é a função harmônica esférica e χ_{sm_s} é a função de onda do spin intrínseco dos dois fragmentos.

A equação integrodiferencial resultante é da forma

$$\left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{\ell(\ell+1)}{R^2} \right) + E - (V_D)_{\mathbf{J}\ell}(R) \right\} g_{\mathbf{J}\ell}(R) =$$

$$= \int_0^\infty k_{\mathbf{J}\ell}(R, R') g_{\mathbf{J}\ell}(R') dR' \quad (\text{II-38})$$

Para obter as defasagens impõe-se as condições de contorno para $g_{\mathbf{J}\ell}$

$$g_{J\ell}(0) = 0$$

$$g_{J\ell}(R) \underset{R \rightarrow \infty}{\sim} \sin(kR - \frac{1}{2}\ell\pi - \eta \ln 2kR + \sigma_\ell + \delta_{J\ell})$$

onde

$$\eta = Z_1 Z_2 e^2 / \hbar v \quad \text{com} \quad v = \sqrt{\frac{2E}{\mu}}$$

σ_ℓ = defasagem coulombiana = $\arg \Gamma(\ell + 1 + i\eta)$

$\delta_{J\ell}$ = defasagem nuclear

Para estados ligados impomos que assintoticamente $g_{J\ell}(R)$ seja nulo.

A equação (II-38) é resolvida numericamente [TSW 63] dividindo-se a região da integração em duas partes:

a) na primeira região o operador $h_{J\ell}(R, R')$ é transformado numa matriz quadrada $N \times N$ com um passo ε em R e R' , e a equação (II-38) é convertida num conjunto de N equações algébricas que é resolvido simultaneamente [Ro 56].

b) a segunda região é escolhida de tal maneira que $h_{J\ell}(R, R')$ pode ser desprezada e a equação (II-38) se transforma numa equação diferencial que é resolvida numericamente [FG 49].

Uma forma alternativa de resolver a equação (II-38) é através dos determinantes de Fredholm, utilizada por Lumbroso [Lu 74]. Os detalhes desse método serão explicitados no Capítulo V, onde discutiremos o espalhamento ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}$, pelo Método de Coordenadas Geradoras.

CAPÍTULO III

MÉTODO DE COORDENADAS GERADORAS

III.A - INTRODUÇÃO

O Método de Coordenadas Geradoras (MCG) foi originalmente formulado por Griffin, Hill e Wheeler [HW 53, GW 57] para estudar movimentos coletivos sem introduzir graus de liberdade espúrios e sem precisar explicitar os graus de liberdade coletivos em termos das variáveis dinâmicas do sistema.

É uma teoria microscópica do movimento coletivo que reduz o problema de muitos corpos restringindo o respectivo espaço de Hilbert a um sub-espacô coletivo em que, nos casos ideais, os graus de liberdade coletivo e os intrínsecos estão completamente desacoplados.

O MCG foi utilizado com sucesso para descrever propriedades coletivas dos núcleos em física nuclear e devido a sua generalidade, ele está sendo utilizado também para estudar sistemas atômicos e moleculares [LL 82, TP 83].

III.B - FORMULAÇÃO DO MÉTODO DE COORDENADAS GERADORAS

No Método de Coordenadas Geradoras a função de onda de um sistema de A partículas, $\psi(r_1, \dots, r_A)$ é construída através de uma superposição linear das chamadas funções geradoras $\phi(r_1, \dots, r_A; \alpha)$

(III.1)

onde r_i são as coordenadas das partículas e α é um parâmetro, chamado coordenada geradora, que identifica as funções geradoras $\phi(r_1 \dots r_A; \alpha)$ e pertence a um espaço de rótulos que poderá ser uma região do \mathbb{R}^n .

Na proposta original de Hill-Wheeler [HW 53] a função de onda geradora $\phi(r_1 \dots r_A; \alpha)$ é uma solução de uma hamiltoniana do sistema de A partículas não correlacionadas, no entanto essa restrição pode ser levantada sem nenhum prejuízo ao método.

Embora o método prescinda a priori, de uma referência explícita a uma variável dinâmica coletiva, o sucesso do MCG depende da intuição física que se tem sobre o movimento coletivo focalizado para orientar a escolha do conjunto das funções geradoras que determinarão o sub-espacó coletivo S. Uma vez feita essa escolha, a forma particular de parametrização utilizada para as funções geradoras é irrelevante [PP 78]: o conteúdo físico do método está totalmente definido pelo conjunto das funções de onda geradoras $\phi(r_1 \dots r_A; \alpha)$.

Posteriormente podemos definir as variáveis dinâmicas coletivas que nos permitem descrever o sistema de muitos corpos em termos de um número restrito de graus de liberdade "coletivos" [PP 80], onde por coletivo se entende adaptado ao particular sub-espacó S, selecionado através da escolha de funções geradoras.

A função peso $f(\mathcal{L})$ da equação (III.1) é determinada através do princípio variacional de Ritz:

$$\delta E = 0 \quad \text{ou} \quad \frac{\delta E}{\delta f} = 0 \quad (\text{III.2})$$

onde

$$E = \frac{\int \psi^*(r_1, \dots, r_A) H \psi(r_1, \dots, r_A) d\tau_1 \dots d\tau_A}{\int \psi^*(r_1, \dots, r_A) \psi(r_1, \dots, r_A) d\tau_1 \dots d\tau_A} \quad (\text{III.3})$$

H é a hamiltoniana do sistema de A partículas.

Como as funções que dependem das coordenadas individuais das partículas são todas conhecidas, as integrais que envolvem essas variáveis podem ser calculadas e podemos reescrever a energia do sistema numa forma mais compacta

$$E = \frac{\int f^*(\alpha) K(\alpha, \alpha') f(\alpha') d\alpha d\alpha'}{\int f^*(\alpha) N(\alpha, \alpha') f(\alpha') d\alpha d\alpha'} \quad (\text{III.4})$$

onde definimos as seguintes expressões:

$$\begin{Bmatrix} N(\alpha, \alpha') \\ K(\alpha, \alpha') \end{Bmatrix} = \int \varphi^*(r_1, \dots, r_A; \alpha) \begin{Bmatrix} 1 \\ H \end{Bmatrix} \varphi(r_1, \dots, r_A; \alpha') d\tau_1 \dots d\tau_A \quad (\text{III.5})$$

Chamaremos $N(\alpha, \alpha')$ de núcleo de superposição e $K(\alpha, \alpha')$ de núcleo de energia e são duas grandezas hermitianas, isto é,

$$N^*(\alpha, \alpha') = N(\alpha, \alpha') \quad (\text{III.6})$$

$$K^*(\alpha, \alpha') = K(\alpha, \alpha') \quad (\text{III.7})$$

A variação do valor esperado da energia em relação à função peso, nos levará à equação dinâmica do Método de Coordenadas

das Geradoras, conhecida como Equação de Griffin-Hill-Wheeler (GHW)

$$\int [K(\lambda, \lambda') - EN(\lambda, \lambda')] f(\lambda') d\lambda' = 0 \quad (\text{III.8})$$

A solução analítica dessa equação é possível apenas para alguns sistemas especiais de modo que em geral ela é resolvida numericamente através de discretização, o que é conhecido como método direto.

É um fato conhecido (veja a referência [RS 80]) que quando a variação (III.2) é feita sem restrições, no espaço de Hilbert de muitos corpos a condição de extremo variacional é equivalente à equação de Schrödinger exata.

A aproximação no uso do método variacional provém da restrição que fizemos na escolha das funções de onda de prova. No caso do Método de Coordenadas Geradoras a restrição está contida no particular "anzatz" (III.1).

Ao escrevermos as funções de onda de prova na forma da Eq. (III.1), fizemos uma restrição do problema definido no espaço de Hilbert de muitos corpos a um sub-espacô coletivo S , de modo que os resultados obtidos pelo Princípio Variacional devem ser equivalentes à restrição do problema de muitos corpos nesse sub-espacô coletivo, isto é, à equação de Schrödinger para a hamiltoniana projetada

$$(P_S H P_S - E) P_S |\Psi\rangle = 0 \quad (\text{III.9})$$

onde P_S é o operador de projeção sobre o sub-espacô coletivo S .

A medida de quão acertada foi, a escolha do sub-espacô coletivo S, através das funções geradoras, pode ser expressa pela condição

$$[\mathcal{P}_S, H] = 0 \quad (\text{III.10})$$

Para garantirmos que o conjunto das simetrias $\{A_i\}$ de H sejam preservadas na hamiltoniana projetada devemos ter também:

$$[\mathcal{P}_S, A_i] = 0 \quad (\text{III.11})$$

onde $\{A_i\}$ são os operadores unitários que implementam as simetrias, $[A_i, H] = 0$.

Wong [Wo 70] estudou a relação existente entre a solução da Equação de GHW e a Eq. (III.9) e no caso em que o núcleo de superposição é do tipo gaussiano, mostrou que a Eq. (III.9) pode ter soluções que não podem ser obtidas resolvendo a Equação de GHW.

O artigo de Toledo Piza e outros [PPG 77] esclarece essa questão relacionando a não convergência das soluções das duas equações (Eq. (III.9) e Eq. (III.8)) com o fato de que o espaço linear formado pelo conjunto de função de onda tentativa da forma (III.1) diferir do sub-espacô coletivo S por não ser um espaço fechado.

As condições em que se observa a equivalência entre as duas soluções dependem basicamente da propriedade do núcleo de superposição $N(\alpha, \alpha')$.

Para núcleos de superposição $N(\alpha, \alpha')$ do tipo Hilbert-

Schmidt, isto é,

$$\int d\alpha d\alpha' |N(\alpha, \alpha')|^2 < \infty \quad (\text{III.12})$$

a função de onda tentativa do M C G forma um sub-espacô linear fechado no espaço de Hilbert de muitos corpos, somente quando o sub-espacô gerado pelas auto-funções de $N(\alpha, \alpha')$ com auto-valor diferente de zero, que chamaremos de L_1 , tiver dimensão finita. Uma consequência imediata de termos um sub-espacô L_1 de dimensão infinita e portanto não termos um sub-espacô coletivo fechado é que a diagonalização da Hamiltoniana no sub-espacô coletivo S , pode ter soluções que não podem ser obtidas pela Eq. de GHW, o que gera funções peso singulares.

Esse resultado pode ser generalizado para núcleos de superposição $N(\alpha, \alpha')$ mais gerais, já que, através de uma parametrização [PP 78] ou introdução de uma medida conveniente [La 76], podemos transformá-los em núcleos do tipo Hilbert-Schmidt.

III.C - MÉTODO DE COORDENADA GERADORA DISCRETIZADO

Na versão discretizada do MCG a função de onda tentativa (III.1) é substituída por

$$\Psi = \sum_i c_i \phi(\alpha_i) \quad (\text{III.13})$$

onde α_i é um elemento de um intervalo discretizado no espaço dos

rótulos e os C_i são os pesos que substituem a função $f(\alpha)$.

A equação de GHW discretizada é da forma

$$\sum_j (H_{ij} - E_n N_{ij}) c_j^{(n)} = 0 \quad (\text{III.14})$$

onde

$$H_{ij} = H(d_i, d_j) \quad (\text{III.15})$$

$$N_{ij} = N(d_i, d_j) \quad (\text{III.16})$$

Existem técnicas para a escolha do intervalo discretizado no espaço dos rótulos a que o conjunto $\{\alpha_i\}$ pertence:

(i) intervalo com os espaçamentos $\Delta\alpha$ definidos por uma prescrição adequada, em torno de uma coordenada geradora α_0 que minimiza a equação [Ra 75]

$$E(\lambda) = \frac{H(\lambda, \lambda')}{N(\lambda, \lambda')} \quad (\text{III.17})$$

(ii) considera todos os parâmetros não lineares α_i como parâmetros variacionais [Ho 67].

(iii) escolha do conjunto $\{\alpha_i\}$ com base numa regra de quadratura [TS 77].

iv) o conjunto $\{\alpha_n\}$ é escolhido da seguinte forma: escolhidos os primeiros $n-1$ pontos ($n \geq 1$), α_n é tal que minimiza a energia obtida pela diagonalização da hamiltoniana definida no espaço n -dimensional gerado por $\phi(\alpha_1)\phi(\alpha_2)\dots\phi(\alpha_n)$ [BD 79, ABD 81].

Uma vez escolhido o conjunto $\{\alpha_i\}$ a solução da equação

(III.14) é encontrada, invertendo a matriz N_{ij} e diagonalizando o produto $(N^{-1} H)_{ij}$. No entanto, a inversão da matriz N_{ij} só é possível se ela não tiver auto-valor nulo, o que pode não acontecer porque o conjunto das funções geradoras não é ortogonal e pode ser linearmente dependente.

Como, no entanto, as auto-funções do núcleo de superposição $N(\alpha, \alpha')$ com auto-valor nulo geram estados de norma nula no espaço de Hilbert de muitos corpos, devemos restringir as funções peso ao sub-espacô L_1 (do contrário não teremos correspondência única entre as funções peso e os vetores do espaço de Hilbert de muitos corpos).

O problema que aparece na discretização da Eq. de GHW, está ligado ao não fechamento do espaço linear da forma (III.1). Ele vem da existência dos auto-valores do $N(\alpha, \alpha')$, (suposto de Hilbert Schmidt), com auto-valores arbitrariamente pequenos, quando L_1 tem dimensão infinita.

A consequência prática do que foi exposto acima é que quanto menor for o espaçamento $\Delta\alpha$ entre os pontos α_i , as soluções $C_j^{(n)}$ num dado ponto α_j , oscilam mais violentamente, de modo que não conseguimos estabilizar $C_j^{(n)}$.

Uma alternativa para contornar esse problema foi proposta numa série de artigos [PPG 77, PP 78, PP 80]: consiste em construir explicitamente um sub-espacô coletivo S , do espaço de Hilbert de muitos corpos, a partir dos estados geradores $|\alpha\rangle$ selecionados heuristicaamente. O sub-espacô coletivo S é o complemento do conjunto dos estados de muitos corpos que podem ser escritos na forma da equação (III.1) com funções peso de quadrado integrável.

A escolha de uma representação coletiva, no sub-espacô

S , na qual o núcleo de superposição $N(\alpha, \alpha')$ é diagonal, elimina os problemas referentes à singularidade da função peso.

Na secção seguinte apresentaremos o formalismo dessa proposta, que usaremos para estudar o espalhamento nuclear.

III.D - SUB-ESPAÇO COLETIVO NO MCG

A construção do subespaço coletivo S , [PPG 77, PP 78], selecionado através da escolha das funções geradoras tem como ingrediente básico o núcleo de superposição dos estados geradores, $N(\alpha, \alpha')$.

Para um operador, $N(\alpha, \alpha')$, positivo e limitado (auto-adjunto) no espaço das funções quadrado integráveis, o teorema espectral da Análise Funcional [RS 72], afirma que existe um operador unitário $U_k(\alpha)$ que reduz o núcleo de superposição $N(\alpha, \alpha')$ a uma forma diagonal, tal que:

$$\int U_{k'}^*(\lambda) N(\lambda, \lambda') U_k(\lambda') d\lambda d\lambda' = \Lambda(k) \delta(k - k') \quad (\text{III.18})$$

Equivalentemente podemos escrever a equação de autoválor

$$\int N(\lambda, \lambda') U_k(\lambda') d\lambda' = \Lambda(k) U_k(\lambda) \quad (\text{III.19})$$

com $\Lambda(k)$ pertencente ao espectro de $N(\alpha, \alpha')$.

O espaço nulo de $N(\alpha, \alpha')$, isto é, o subespaço formado

pelas autofunções com autovalor nulo, é removido pois ele gera estados no subespaço coletivo com norma nula. Estes estados são uma decorrência da dependência linear dos estados geradores que nos permite descrever por meio de funções pesos diferentes um mesmo estado coletivo.

Podemos construir uma base no subespaço coletivo S através dos estados

$$|k\rangle = \frac{\int u_k(\alpha) |\alpha\rangle d\alpha}{\Lambda^{\gamma_2}(k)} \quad (\text{III.20})$$

com $\Lambda(k) \neq 0$

que satisfazem as relações de completeza e ortonormalidade

$$\begin{aligned} \int dk |k\rangle \langle k| &= \hat{1}_S \\ \langle k|k'\rangle &= \delta(k - k') \end{aligned} \quad (\text{III.21})$$

O subespaço coletivo S gerado pelos estados coletivos $|k\rangle$ é o completamento do "espaço GHW", gerado pelos estados da forma

$$|\psi\rangle = \int d\alpha |\alpha\rangle f(\alpha)$$

com $f(\alpha)$ quadrado integrável.

A projeção da dinâmica de muitos corpos, descrita pela equação de Schrödinger de muitos corpos, no subespaço coletivo, nos dá, na versão estacionária a equação de Schrödinger coletiva

$$\int H_c(k, k') \psi(k') dk' = E \psi(k) \quad (\text{III.22})$$

onde

$$H_c(k, k') = \langle k | H | k' \rangle =$$

$$= \int \frac{U_k^+(k)}{\Lambda^2(k)} \langle \alpha | H | \alpha' \rangle \frac{U_{k'}^-(\alpha')}{\Lambda^2(\alpha')} dk dk' \quad (\text{III.23})$$

$$\psi(k) = \Lambda^2(k) \int U_k^+(\alpha) f(\alpha) d\alpha \quad (\text{III.24})$$

A função de onda coletiva $\psi(k)$ nada mais é do que a função de onda de muitos corpos da equação (III.1) na representação em que $N(\alpha, \alpha')$ é diagonal, isto é:

$$\psi(k) = \langle k | \psi \rangle = \int \frac{U_k^+(\alpha)}{\Lambda^2(k)} \langle \alpha | \psi \rangle d\alpha \quad (\text{III.25})$$

substituindo $|\psi\rangle$ pela Eq. (III.1) e usando a equação de autovetor (III.19) obtemos a Eq. (III.24).

Os operadores coletivos \hat{p} e \hat{q} podem ser definidos como

$$\hat{p} |k\rangle = \hbar k |k\rangle \quad (\text{III.26})$$

$$\hat{q}|k\rangle = i \frac{\partial}{\partial k} |k\rangle \quad (\text{III.27})$$

e satisfazem a relação de comutação

$$[\hat{q}, \hat{p}] = i\hbar \hat{I}_s \quad (\text{III.28})$$

Quando α é associada a uma coordenada obtemos a hamiltoniana coletiva na representação do momento coletivo. Podemos obter a equação de Schrödinger coletiva, (III.22), na representação de coordenada, isto é, na representação em que o operador \hat{q} é diagonal

$$\hat{q}|x\rangle = x|x\rangle \quad (\text{III.29})$$

calculando a transformada de Fourier dupla:

$$H(x, x') = \iint \frac{e^{ikx}}{(2\pi)^{1/2}} \langle k|H|k'\rangle \frac{e^{-ik'x'}}{(2\pi)^{1/2}} dk dk' \quad (\text{III.30})$$

E a função de onda coletiva na representação da coordenada coletiva é:

$$\begin{aligned}\Psi(x) &= \langle x | \Psi \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int e^{-ikx} \langle k | \Psi \rangle dk \\ &= \iint dk_1 dk_2 e^{-ik_1 x} \Lambda_{k_1}(k_2) U_{k_1}^*(k_2) f(k_2) dk_2\end{aligned}\quad (\text{III.31})$$

Podemos também obter a hamiltoniana coletiva escrita em termos dos operadores coletivos \hat{p} e \hat{q} , usando o método proposto por Klein [Kl 71] (veja por exemplo a referência [PC 81]) ou através do formalismo de Weyl [We 27] utilizado na referência [GP 81].

O espectro da hamiltoniana coletiva (III.23) é obtida numericamente, diagonalizando-a num espaço truncado através da eliminação dos autovetores $U_k(\alpha)$ do núcleo de superposição com autovalor menor que um certo limite, o que equivale a desprezar contribuição da função de onda $\psi(k)$, (III.24), com norma aproximadamente nula.

O problema específico do espalhamento nuclear será discutido no Capítulo seguinte.

CAPÍTULO IV

MCG PARA ESPALHAMENTO NÚCLEO-NÚCLEO

IV.A - INTRODUÇÃO

No capítulo precedente formulamos o MCG para o estudo de movimentos coletivos em sistemas gerais, tais como atômicos, moleculares e nucleares.

Neste capítulo apresentaremos o MCG aplicado ao espalhamento elástico de dois núcleos.

Os trabalhos pioneiros nessa área surgiram na década de setenta [Ho 70, Ta 72] no estudo do espalhamento α - α . A principal dificuldade encontrada na aplicação do MCG para o espalhamento era a escolha de uma condição de contorno apropriada para a função peso $f(\alpha)$, já que ela não pode ser interpretada como função de onda. Tanto no trabalho de Horiuchi [Ho 70], quanto no de Takacsy [Ta 72], os resultados dependiam fortemente do raio R_0 , que era escolhido para juntar $f(\alpha)$ com a função de onda assintótica.

A conexão que existe entre o MCG e o MGR permitiu que surgissem métodos híbridos em que se procurava aliar as vantagens de ambos os métodos.

No estudo do espalhamento núcleo-núcleo pelo MCG existem basicamente duas alternativas para obtermos as defasagens e o espectro do núcleo composto: o método direto, em que os cálculos são feitos na representação de coordenadas geradoras e o método indireto, em que a equação MCG é transformada na equação do MGR, os cálculos das defasagens e estados ligados sendo então

feitos na representação de coordenadas ou de momentos.

Faremos inicialmente a apresentação do formalismo como é utilizado no problema do espalhamento elástico e mostraremos a conexão que existe entre o MCG e o MGR. A seguir, faremos uma exposição de alguns dos procedimentos utilizados para resolver a equação de Griffin-Hill-Wheeler com condição de contorno de espalhamento.

IV.B - ESPALHAMENTO ELÁSTICO NÚCLEO-NÚCLEO

No estudo do espalhamento elástico de dois núcleos no MCG, consideramos uma função de onda geradora da forma

$$\phi_{\mathcal{L}} = \mathcal{A} \left\{ \varphi_1(r_1, \dots, r_{A_2}, \mathcal{L}) \varphi_2(r_1, \dots, r_{A_2}, \mathcal{L}) \chi(\sigma, \tau) \right\} \quad (\text{IV.1})$$

onde

\mathcal{A} = operador de antissimetriação

r_i = coordenadas espaciais dos nucleons

\mathcal{L} = coordenada geradora definida como a distância entre os centros do poço de potencial dos dois núcleos, com n.os de massa igual a A_1 e A_2

$\chi(\sigma, \tau)$ = função de onda que depende das coordenadas de spin e isospin dos nucleons.

A função de onda de prova para esse sistema é escrita como

$$\Psi = \int f(\alpha) \phi_\alpha d\alpha \quad (\text{IV.2})$$

A escolha de uma coordenada geradora vetorial e a combinação linear acima, onde α assume todos os valores possíveis nos dá um subespaço coletivo invariante por rotação.

No caso particular em que as funções de onda antissimétrizadas dos fragmentos 1 e 2 forem descritas por determinantes de Slater com funções de onda de partícula independente de um potencial de oscilador harmônico de parâmetro b (igual para os dois fragmentos), a função de onda geradora pode ser escrita na forma fatorada

$$\phi_\alpha = \phi_{cm}(R_{CM}) \cdot [T(\alpha, R) \phi_1(z_1) \phi_2(z_2)] \quad (\text{IV.3})$$

A coordenada do centro de massa R_{CM} e a coordenada relativa R são definidas pelas equações

$$R_{CM} = \frac{\sum_{i \in 1}^{A_1} m_i r_i + \sum_{i \in 2}^{A_2} m_i r_i}{A_1 + A_2} \quad (\text{IV.4})$$

$$R = \frac{1}{A_1} \sum_{i \in 1}^{A_1} r_i - \frac{1}{A_2} \sum_{i \in 2}^{A_2} r_i \quad (\text{IV.5})$$

ξ_1 e ξ_2 são as coordenadas intrínsecas dos núcleos 1 e 2 respectivamente e as funções $\phi_1(\xi_1)$ e $\phi_2(\xi_2)$ não dependem do parâmetro α .

Ainda

$$T(R, k) = (\pi \beta^2)^{-\frac{3}{4}} \exp \left[-\frac{(R-k)^2}{2\beta^2} \right] \quad (IV.6)$$

onde

$$\beta^2 = \frac{b^2 A}{A_1 A_2} \quad (IV.7)$$

A função de onda geradora (IV.3) é do tipo produto, portanto o formalismo é invariante por transformação de Galileu e consequentemente podemos ignorar o movimento do centro de massa.

A função de onda de prova do MCG para o movimento relativo dos fragmentos terá a seguinte expressão

$$\psi = \phi_1(\xi_1) \phi_2(\xi_2) g(R) \quad (IV.8)$$

onde

$$g(R) = \int T(R, k) f(k) dk \quad (IV.9)$$

A função de onda ψ da eq. (IV.8) é exatamente a função de onda utilizada no Método de grupo ressonante, eq. (II.1), e os núcleos dos operadores serão relacionados pela equação (IV.9a)

$$\langle k | H | k' \rangle = \int T(k, R) \langle R | H | R' \rangle T(R', k') dR dR' \quad (IV.9a)$$

Portanto a escolha da função de onda geradora como descrito aci-

ma, leva à equivalência do MCG com o MGR.

Podemos explicitar de uma forma mais clara a equivalência do MCG com o MGR, dentro do formalismo de Piza e Passos [PP 78].

A equação de Griffin-Hill-Wheeler é escrita como

$$\int [H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - E_{\mathbf{k}} N(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] f(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' \quad (\text{IV.10})$$

onde $H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \mathbf{k} | \mathcal{H} | \mathbf{k}' \rangle \quad (\text{IV.11})$

$$N(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle \quad (\text{IV.12})$$

com \mathcal{H} = hamiltoniana de muitos corpos com interação nuclear de dois corpos.

O núcleo de superposição $N(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ pode ser escrito como soma de dois termos [Fr 81]

$$N(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = N_D(\mathbf{k}, \mathbf{k}') + N_T(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (\text{IV.13})$$

O termo direto $N_D(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é um termo de longo alcance e é uma função apenas da diferença $(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ enquanto o termo $N_T(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é uma contribuição de troca que tem um comportamento de curto alcance

$$N_D(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int T(\mathbf{k}, \mathbf{R}) T(\mathbf{k}', \mathbf{R}) d\mathbf{R} = \exp \left[-(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \frac{A_1 A_2}{4 \pi b^2} \right] \quad (\text{IV.14})$$

Podemos diagonalizar o termo de longo alcance, através da transformada de Fourier:

$$\int N_D(k, k') U_{kk'}(k') dk' = \Lambda(k) U_{kk}(k) \quad (\text{IV.15})$$

onde

$$U_{kk}(k) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{ik \cdot \vec{k}} \quad (\text{IV.16})$$

$$\Lambda(k) = \left(\frac{4b^2 \pi A}{A_1 A_2} \right)^{3/2} \exp \left[- \frac{k^2 b^2}{A_1 A_2} \right] \quad (\text{IV.17})$$

A representação natural no subespaço coletivo S é dada por

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{\Lambda(k)}} \int |k'\rangle U_{kk'}(k') dk' \quad (\text{IV.18})$$

A Eq. de GHW nessa representação é dada por

$$\int \frac{U_{kk}^*(k)}{\sqrt{\Lambda(k)}} \left[\langle k | H | k' \rangle - E_k \langle k | k' \rangle \right] \frac{U_{kk'}(k')}{\sqrt{\Lambda(k')}} g(k') dk dk' dk' = 0 \quad (\text{IV.19})$$

onde

$$g(k) = \int \frac{U_{kk}^*(k)}{\sqrt{\Lambda(k)}} f(k) dk \quad (\text{IV.20})$$

A eq. (IV.19) pode ser reescrita como

$$\int [h(k, k') - E_k N(k, k')] g(k') dk' = 0 \quad (\text{IV.21})$$

O vetor \mathbf{k} é uma variável dinâmica associado ao momento coletivo P_S projetado no subespaço coletivo S e através da transformada de Fourier inversa podemos obter a equação (IV.21) na representação de coordenadas

$$\int [h(x, x') - E_x N(x, x')] g(x') dx' \quad (\text{IV.22})$$

onde

$$g(x) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-ik \cdot x} g(k) dk \quad (\text{IV.23})$$

$g(\mathbf{x})$ é a função de onda relativa $g(\mathbf{R})$ do MGR, e a equação (IV.22) é equivalente à eq. (II.6) do MGR.

A diferença entre os dois métodos provém do procedimento inicial: no MGR se toma a variável dinâmica \mathbf{R} , de partida; enquanto no MCG, se parte de um parâmetro \mathbf{k} que não é uma variável dinâmica e se constrói, uma variável dinâmica que pode eventualmente ser identificada com \mathbf{R} "a posteriori" dada a escolha das funções geradoras parametrizadas por \mathbf{k} .

Nessa construção do subespaço coletivo fica visível a interpretação dada por Friedrich [Fr 81] de que o MGR é o MCG numa representação assintoticamente ortogonal (diagonalizamos apenas o termo de longo alcance).

IV.C - DIAGONALIZAÇÃO COMPLETA DO N(\mathbf{k} , \mathbf{k}')

A conveniência de se obter uma base completamente ortogonal foi salientada por Fliessbach [Fl 75] que observou uma grande influência da ortogonalização da base do MGR sobre o cálculo do decaimento α .

No formalismo de Piza-Passos [PP 78] a base ortogonal é obtida através de uma isometria parcial entre o subespaço coletivo e o espaço das funções peso, que admite uma decomposição de tal maneira que a diagonalização do núcleo de superposição pode ser viabilizada em duas etapas sucessivas:

Primeira Etapa: Diagonalização do termo de longo alcance, utilizando a dupla transformada de Fourier

$$\iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \frac{U_{\mathbf{k}_2}^*(\mathbf{k})}{\sqrt{\Lambda(\mathbf{k}_2)}} N(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{U_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{k}')}{\sqrt{\Lambda(\mathbf{k}'_2)}} = \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - K(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \quad (\text{IV.24})$$

onde o termo em $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ deve ser convenientemente substituído conforme a equação (II-12) para fragmentos idênticos e $K(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é um operador de Hilbert-Schmidt.

Segunda Etapa: A equação de autovalor para o operador $K(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é

$$\int K(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \varphi_n(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \mu_n \varphi_n(\mathbf{k}) \quad (\text{IV.25})$$

onde $\mu_n \leq 1$. As autofunções $\psi_n(\mathbf{k})$ com autovalor $\mu_n = 1$, são os estados proibidos pelo princípio de exclusão de Pauli e existem

no máximo um número finito deles. A diagonalização do termo de curto alcance é obtida então através da equação

$$\iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \varphi_m^*(\mathbf{k}) [\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - K(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] \varphi_{m'}(\mathbf{k}') = (1 - \mu_n) \delta_{nn'} \quad (\text{IV.26})$$

A diagonalização do núcleo de superposição original $N(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ é dada por

$$\iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \frac{\varphi_m^*(\mathbf{k})}{\sqrt{1 - \mu_n}} \frac{U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^*(\mathbf{k})}{\sqrt{\Lambda(\mathbf{k})}} N(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \frac{U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{k}')}{\sqrt{\Lambda(\mathbf{k}')}} \frac{\varphi_{m'}(\mathbf{k}')}{\sqrt{1 - \mu_{n'}}} = \delta_{nn'} \quad (\text{IV.27})$$

com $\mu_n \neq 1$.

A equação de Schrödinger de muitos corpos no subespaço coletivo é então escrita como

$$\sum_{m'} [h_{nn'} - E \delta_{nn'}] g_{m'} = 0 \quad (\text{IV.28})$$

onde

$$h_{nn'} =$$

$$= \iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \frac{\varphi_m^*(\mathbf{k})}{\sqrt{1 - \mu_n}} \frac{U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^*(\mathbf{k})}{\sqrt{\Lambda(\mathbf{k})}} \langle \mathbf{k} | H | \mathbf{k}' \rangle \frac{U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}(\mathbf{k}')}{\sqrt{\Lambda(\mathbf{k}')}} \frac{\varphi_{m'}(\mathbf{k}')}{\sqrt{1 - \mu_{n'}}}$$

(IV.29)

$$g_m = \sqrt{1-\mu_n} \iint d\mathbf{k} d\mathbf{k}' \sqrt{\Lambda(\mathbf{k}')} \varphi_m^*(\mathbf{k}') U_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^*(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) \quad (\text{IV.30})$$

Para função de onda geradora descrita por funções de onda de partícula independente de oscilador harmônico, com parâmetros de oscilador b, iguais para os dois fragmentos, as auto-funções e autovalores do núcleo $K(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ são conhecidas [Za 71, HS 73], são funções de onda de oscilador harmônico, com o parâmetro do oscilador definido conforme a equação (II.28).

IV.D - SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DO MCG PARA ESPALHAMENTO ELÁSTICO

Nessa seção faremos um breve comentário sobre alguns dos métodos utilizados para resolver a equação do MCG para espalhamento. Uma revisão mais detalhada, principalmente daqueles métodos relacionados com a teoria microscópica da Matriz-R pode ser encontrada no artigo de Bennett, Robson e Tobocman [BRT 83].

Existem na literatura, dois procedimentos distintos para resolver o problema do espalhamento elástico através do Método de Coordenadas Geradoras, que são chamados método direto e método indireto.

Nos dois procedimentos citados acima, usa-se a conexão que existe entre o MGR e o MCG (seção IV.B). O que os diferencia é que no método indireto essa conexão é utilizada para calcular os operadores do MGR a partir dos núcleos do MCG, ao passo

que no método direto ela é usada para relacionar a função de onda do MGR com a função peso do MCG.

Método direto - Um dos primeiros trabalhos de espalhamento nuclear, que usou o MCG, foi publicado por Horiuchi em 1970 [Ho 70]. Ele formulou a Teoria Microscópica da Matriz-R, em que a equação de GHW é resolvida somente na região de interação e usa a função de onda do MGR na região assintótica. Na sua forma original o método de Horiuchi dependia fortemente do raio escolhido para a região de interação (raio diferente para cada onda parcial), mas a generalização do método por Baye e Heenen [BH 74] através de uma teoria completamente antissimetrizada de Matriz-R, levou à desejável invariança do método em relação ao raio da região interna, assim como a eliminação das ressonâncias espúrias a altas energias. A força coulombiana é tratada exatamente e a vantagem dessa teoria é que ela pode ser facilmente generalizada para reações com vários canais abertos.

Canto e Brink usaram o método variacional de Kohn ("método 2" da referência [CB 77]) para obter uma solução aproximada da equação do MGR, que é equivalente à Teoria Microscópica da Matriz-R [BRT 83]. Uma outra linha de trabalho em que a equação de Griffin-Hill-Wheeler é resolvida em todo o espaço das configurações foi iniciada por Takacsy [Ta 72]. Uma condição de contorno de espalhamento foi aplicada à função peso $f_{\mathbf{k}}$, e a inclusão da força coulombiana nesse método foi feita por Tanabe, Tohsaki e Tamagaki [TTT 73], escrevendo a condição de contorno de espalhamento para a função peso em termos de funções de onda de Coulomb. Uma forma alternativa de incluir interação coulombiana no método de Takacsy foi formulada por Friedrich, Hüsker e Weiguny [FWH 74], através de uma representação mais complexa para a função peso

assintótica. No entanto a solução direta da equação de Griffin-Hill-Wheeler apresenta problemas de convergência devido ao caráter singular da função peso: à medida que diminuirmos a distância entre os pontos de uma malha, a função peso começa a oscilar violentamente. Modificações desse método, baseadas na fórmula de transformação (IV.9) entre o MGR e o MCG foram implementadas de modo que as condições de contorno assintóticas sejam satisfeitas não pela função peso, mas pela função de onda relativa $g(R)$ do MGR. Nessa linha estão os trabalhos de Husken, Wedekind e Weiguny [HWW 77], o "método 1" de Canto e Brink [CB 77] e o método variacional de Kohn utilizado por Beck e outros [BBM 75]. Quanto à interação coulombiana, Husken [HWW 77] não a inclue nos seus cálculos, Canto [CB 77] usa uma aproximação e Beck [BBM 75] a trata exatamente.

Método indireto - A obtenção dos operadores do MGR através dos núcleos do MCG foi feita através da deconvolução numérica da equação (IV.9a) por Friedrich [Fr 74]. Essa técnica no entanto, é comprometida para fragmentos mais pesados do que a partícula pelas flutuações de curto alcance dos núcleos de potenciais de troca que exigem cálculos de extrema precisão no MCG, para compensar fatores Γ^{-1} muito grandes. Kamimura e Matsuse [KM 74] utilizaram expansões em funções de onda de oscilador dos potenciais não locais e determinaram os coeficientes da expansão através dos núcleos do MCG. Para sistemas pesados, o número de termos necessários para obter a convergência das expansões aumenta, o que limita a aplicabilidade dessa técnica. No entanto ela possui a vantagem de ser utilizada mesmo no caso em que os dois núcleos tenham parâmetros de oscilador diferentes, gerando operadores do MGR sem contribuição espúrea do centro de massa. Giraud,

Hocquenghem e Lumbroso [GHL 73] descobriram que através de uma mudança da representação da equação de Griffin-Hill-Wheeler, usando a dupla Transformada de Fourier, a deconvolução dos núcleos do MCG pode ser feita analiticamente, e a equação do MGR assim obtida é resolvida no espaço dos momentos usando o Método de Fredholm, o que impõe restrições sobre o potencial coulombiano que é introduzido aproximadamente.

Uma particularidade dos trabalhos que utilizam os métodos diretos é que eles calculam as defasagens e as seções de choque do espalhamento elástico diretamente sem fazer referência à equação de Schrödinger coletiva do movimento relativo, ao passo que através dos métodos indiretos nós temos um caminho natural para obtermos os potenciais coletivos que atuam entre os núcleos complexos, a partir de uma teoria microscópica.

IV.E - MCG PARA DOIS FRAGMENTOS COM PARÂMETROS DO OSCILADOR DIFERENTES

Todos os trabalhos comentados na seção precedente foram feitos considerando-se funções de onda geradoras com o centro de massa fatorado, isto é, usando funções de onda de oscilador harmônico com parâmetros do oscilador iguais mesmo para fragmentos diferentes.

Um tratamento mais realístico da colisão de dois fragmentos diferentes e a inclusão dos efeitos de distorção durante o espalhamento requer um formalismo adequado para remover o movimento espúreo do centro de massa que aparece nas funções de onda do MCG com parâmetro do oscilador diferentes.

Para dois fragmentos A e B com parâmetros do oscilador b_A e b_B e número de massa N_A e N_B , a função de onda geradora é escrita como [GT 75]

$$\phi_{\alpha} = \mathcal{A} \left\{ \psi_A \left(\frac{N_A \alpha}{N} \right) \psi_B \left(-\frac{N_B \alpha}{N} \right) \right\}$$

$$= \mathcal{A} \left\{ \psi_A^{\text{int}} \psi_B^{\text{int}} G(R_{CM}, R - \alpha) \right\}$$

(IV.31)

onde $\psi_i(\alpha_i)$ e ψ_i^{int} são: função de onda do modelo de camadas com o centro do potencial em α_i e função de onda intrínseca do núcleo e com N_i nucleons e centro de massa R_i , respectivamente, e as coordenadas R_{CM} , R e α são definidas como

$$R_{CM} = \frac{N_A R_A + N_B R_B}{N} \quad \text{com} \quad N = N_A + N_B$$

(IV.32)

$$R = R_A - R_B$$

$$\alpha = \alpha_A - \alpha_B$$

\mathcal{A} é o operador de antissimetriação de todos os N nucleons.

$$G(R_{CM}, R - \mathbf{L}) =$$

$$= \left(\frac{4\pi u - t^2}{\pi^2} \right)^{3/4} \exp \left\{ - \left[s R_{CM}^2 + t R_{CM} (R - \mathbf{L}) + u (R - \mathbf{L})^2 \right] \right\}$$

$$S = \frac{1}{2} \left(\frac{N_A}{b_A^2} + \frac{N_B}{b_B^2} \right) \quad (\text{IV.33})$$

$$t = \frac{N_A N_B}{N} \left(\frac{1}{b_A^2} - \frac{1}{b_B^2} \right)$$

$$u = \frac{N_A N_B}{2N^2} \left(\frac{N_B}{b_A^2} + \frac{N_A}{b_B^2} \right)$$

Para $b_A \neq b_B$ o movimento do centro de massa não é fatorado, porque $t \neq 0$.

Como o MGR é um formalismo livre do movimento espúreo do centro de massa, uma das técnicas utilizadas é a transformação dos núcleos de operadores do MCG, $K(\mathbf{L}, \mathbf{L}')$, em operadores do MGR, $k(R, R')$, através da fórmula de transformação [GT 75]

$$K(\mathbf{L}, \mathbf{L}') = \langle \mathbf{L} | \hat{K} | \mathbf{L}' \rangle$$

$$= \int G(R_{CM}, R - \mathbf{L}) h(R, R') G(R_{CM}, R' - \mathbf{L}') dR_{CM} dR dR'$$

$$= \int G(R - \mathbf{L}, R' - \mathbf{L}') h(R, R') dR dR'$$

(IV.34)

A obtenção do operador $h(R, R')$ através da inversão di-

reta da relação acima é inviável porque \mathcal{G} é um operador singular. A prescrição de Giraud e Letourneux [GT 75] permite obter os operadores do MGR, através dos núcleos do MCG analiticamente, quando os cálculos são feitos com funções de onda do oscilador harmônico e interações gaussianas. No método de Tohsaki - Suzuki [TS 78] a deconvolução dos núcleos do MCG é feita no espaço dos momentos e em seguida através de uma segunda convolução são obtidos os núcleos do MCG numa nova representação, livre do movimento espúreo do centro de massa (New Generator Coordinate Method). O MCG com a coordenada geradora complexa de Sünkel e Wildermuth [SW 72, SU 76] foi utilizado em vários cálculos do MGR [TLT 78] para estudar o espalhamento de fragmentos com parâmetros do oscilador diferentes.

Ao lado desses métodos que utilizam a conexão entre o MCG e o MGR existem técnicas de projeção para a restauração da simetria violada [Wo 75, BDR 79, FT 81] com a subsequente utilização da equação de Griffin-Hill-Wheeler.

A solução mais geral para o problema de função de onda geradora não fatorada, não restrita ao caso do oscilador harmônico, é a utilização da dupla coordenada geradora [PP 80]. A construção do subespaço coletivo do tipo Peierls-Thouless, por outro lado, permite obter uma hamiltoniana coletiva que, ao contrário dos métodos que envolvem a solução direta da equação de Griffin-Hill-Wheeler, não contém soluções instáveis.

CAPÍTULO V

ESPALHAMENTO ${}^3\text{He}-\alpha$ V.A - INTRODUÇÃO

Nesse capítulo estudaremos o espalhamento ${}^3\text{He}-\alpha$ dentro do formalismo Piza-Passos [PP 78], mas com a diagonalização apenas do termo de longo alcance, o que nos leva ao MGR em uma forma equivalente ao método da dupla transformada de Fourier (MDTF) de Giraud e outros [GHL 73, Lu 74]. Vale a pena ressaltar que a diferença entre o formalismo Piza-Passos e o MDTF é a forma como é encarado o papel da dupla transformada de Fourier: de um lado, [PP 78], ele é visto como uma representação adequada de se obter a ortogonalização parcial da representação do MCG, ao passo que [GHL 73] o vê como uma mudança na representação que possibilita a deconvolução dos núcleos do MCG, evitando as singularidades presentes na representação original de coordenadas.

Existem na literatura vários trabalhos que estudam o espalhamento ${}^3\text{He}({}^3\text{H})-\alpha$, dentro do contexto do MGR [TSW 63, BT 68, KBT 74, FBP 82, SKI 80], do MCG [BMP 81] e outros que investigam as propriedades eletromagnéticas do sistema de sete partículas [LKT 81, WLK 83, KMA 84].

Os potenciais nucleon-nucleon utilizados na maioria dos trabalhos é o potencial de Volkov [Vo 65] que possue uma dependência radial do tipo gaussiano, é local e independente da densidade. Uma concordância razoável com as defasagens experimentais é obtida na maioria dos casos, embora as energias de ligação dos fragmentos não tenham valores satisfatórios quando calculado com a mesma interação. A reprodução das ressonâncias na onda F é obtida com a inclusão de potenciais imaginários, com parâ-

metros ajustados a cada energia [FBP 82].

Vários autores [BMP 81, KMA 84], enfatizam a necessidade de se fazer cálculos com forças efetivas mais realísticas, já que os resultados dependem da interação utilizada.

Nesse sentido, acreditamos que cálculo de espalhamento com potenciais dependentes da densidade preenche parte da lacuna existente na literatura. Dentre os vários potenciais dependentes da densidade formulados por diversos autores, escolhemos a interação de Skyrme [Sk 56] que tem sido largamente utilizada nos cálculos de Hartree-Fock [VB 73, Vau 73, BFG 75] para o estudo de propriedades nucleares, tanto dos núcleos esféricos como deformados. Devido à boa concordância com os resultados experimentais e pela facilidade que oferece à manipulação numérica, ela também tem sido escolhida para estudar fenômenos de grande amplitude em teorias microscópicas do movimento coletivo, tais como Método de Hartree-Fock Dependente do Tempo (TDHF) [EBG 75]. Por outro lado a conexão que existe entre essa força e a matriz-G de Brückner [NV 72] é um forte atrativo para estudo de fenômenos nucleares onde se espera uma descrição qualitativa e quantitativa próxima da realidade experimental.

O formalismo utilizado neste trabalho, permite obter uma hamiltoniana coletiva de forma analítica e tanto os estados ligados como propriedades de espalhamento são calculados utilizando-se a mesma técnica numérica (veja a seção V.C).

V.B - HAMILTONIANA COLETIVA

Consideraremos todos os nucleons de cada um dos fragmentos ($A = 3$ e $A = 4$) ocupando o orbital OS de um oscilador harmônico, sem admitir qualquer polarização desses fragmentos durante a colisão. Usaremos também o mesmo parâmetro de oscilador para todos os fragmentos, o que é uma restrição que não compromete muito os resultados [KMA 84]. Efeitos espúrios associados ao centro de massa são eliminados subtraindo da hamiltoniana a energia cinética do centro de massa, como indicado abaixo da equação (V.10).

A função de onda geradora do sistema de sete nucleons será rotulada pela coordenada geradora \mathbf{d} , definida como a distância entre os potenciais de oscilador associados aos fragmentos ${}^3\text{He}$ e ${}^4\text{He}$. Nesse caso, o centro do poço de potencial do oscilador harmônico do ${}^3\text{He}$ estará a uma distância $-\frac{4}{7} \mathbf{d}$ e da partícula ${}^4\text{He}$, $+\frac{3}{7} \mathbf{d}$, em relação a uma origem arbitrária.

Chamando as coordenadas espaciais dos nucleons que compõem o ${}^4\text{He}$ de $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3, \mathbf{r}_4$ e do ${}^3\text{He}$ de $\mathbf{r}_5, \mathbf{r}_6, \mathbf{r}_7$, e indicando as coordenadas de spin e isospin por σ_i e τ_i , respectivamente, onde σ_i e τ_i podem assumir os valores $+\frac{1}{2}$ e $-\frac{1}{2}$, a função de onda geradora terá a forma

$$\Phi_{\mathbf{d}} = \mathcal{A} \{ \varphi(\mathbf{r}_1 - \frac{3}{7}\mathbf{d}) \chi_1 \varphi(\mathbf{r}_2 - \frac{3}{7}\mathbf{d}) \chi_2 \varphi(\mathbf{r}_3 - \frac{3}{7}\mathbf{d}) \chi_3 \varphi(\mathbf{r}_4 - \frac{3}{7}\mathbf{d}) \chi_4 \\ \varphi(\mathbf{r}_5 + \frac{4}{7}\mathbf{d}) \chi_5 \varphi(\mathbf{r}_6 + \frac{4}{7}\mathbf{d}) \chi_6 \varphi(\mathbf{r}_7 + \frac{4}{7}\mathbf{d}) \chi_7 \} \quad (\text{V.1})$$

onde

\mathcal{A} = operador de antissimetriação.



$$\varphi(\mathbf{r}_i - \frac{3}{7}\mathbf{d}) = (\pi b^2)^{-\frac{3}{4}} \exp\left[-\frac{1}{2b^2} (\mathbf{r}_i - \frac{3}{7}\mathbf{d})^2\right] \quad (\text{V.2})$$

$$\Psi(|r_i + \frac{1}{2}k|) = (\pi b^2)^{-\frac{3}{4}} \exp\left[-\frac{1}{2b^2}(|r_i + \frac{1}{2}k|^2)\right] \quad (V.3)$$

e b é o parâmetro do oscilador harmônico comum aos dois núcleos.

A hamiltoniana do sistema com a interação de Skyrme [Sk 59] é da forma

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^7 -\frac{\hbar^2 \nabla_i^2}{2m_i} + \sum_{i>j=1}^7 V_{ij} (|r_i - r_j|) + \sum_{i < j < k} V_{ijk} \quad (V.4)$$

com

$$V_{ij} = t_0 (1 + \rho \sigma) \delta(|r_i - r_j|) + \frac{1}{2} t_1 [\delta(|r_i - r_j|) \mathbb{k}^2 + \mathbb{k}'^2 \delta(|r_i - r_j|)] + t_2 \mathbb{k}' \cdot \delta(|r_i - r_j|) \mathbb{k} + i \omega_0 (\nabla_i + \nabla_j) \cdot \mathbb{k}' \times \delta(|r_i - r_j|) \mathbb{k} \quad (V.5)$$

e

$$V_{ijk} = t_3 \delta(|r_i - r_j|) \delta(|r_j - r_k|) \quad (V.5a)$$

onde

$\rho \sigma$ é o operador de troca de spin

ρ é a densidade nuclear

\mathbb{k} é o operador $(1/2i)(\nabla_i - \nabla_j)$ atuando à direita

\mathbb{k}' é o operador $-(1/2i)(\nabla_i - \nabla_j)$ atuando à esquerda

σ_i são as matrizes de Pauli

Para núcleos par-par a força de três corpos é equivalente à força de dois corpos dependente da densidade [VB 73]

$$V_{ij} = \frac{1}{6} t_3 (1 + \rho \sigma) \delta(|r_i - r_j|) \rho\left(\frac{|r_i + r_j|}{2}\right) \quad (V.5b)$$

No entanto para núcleos ímpares, as duas interações não são equivalentes, e a força de três corpos leva à polarização dos spins dos núcleos [Pa 76] em evidente contradição às propriedades da saturação dos spins e de emparelhamento dos núcleos.

Como o sistema nuclear que estudaremos possue número ímpar de nucleons nós faremos os nossos cálculos usando a interação de dois corpos dependente da densidade dada pela equação (V.5b).

O cálculo dos núcleos dos operadores é feito utilizando-se a técnica de Lowdin [Lo 55].

O núcleo de superposição do sistema de sete partículas é dado por

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle = \exp \left[-\frac{3}{7b^2} (\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2 \right] \times \\ \left\{ 1 - 3 \exp \left(-\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{2b^2} \right) + 3 \exp \left(-\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{b^2} \right) - \exp \left(-\frac{3\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{2b^2} \right) \right\} \quad (V.6)$$

O primeiro termo é o termo direto de longo alcance e os termos restantes são termos de troca de um nucleon, dois nucleons e três nucleons respectivamente.

O termo direto que depende apenas da diferença $(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$, é diagonalizado através de uma transformação de Fourier:

$$\int \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle_{\text{direto}} \varphi_{\mathbf{k}'}(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = \Lambda(\mathbf{k}) \varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) \quad (V.7)$$

onde

$$\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{k}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}} \quad (V.8)$$

com o autovalor [Equações IV.15 - IV.17]

$$\Lambda(\mathbf{k}) = \left(\frac{7b^2\pi}{3} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{7k^2b^2}{12} \right) \quad (V.9)$$

A equação final, no subespaço coletivo tem a forma

$$\int [h(\|k, \|k') - E_N(\|k, \|k')] g(\|k') d\|k' = 0 \quad (\text{V.10})$$

onde

$$\begin{aligned} N(\|k, \|k') &= \delta(\|k - \|k') \\ &- 3 \left(\frac{12b^2}{17\pi} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{169b^2}{24 \times 17} (k^2 + k'^2) + \frac{10}{17} b^2 \|k \cdot \|k' \right] \\ &+ 3 \left(\frac{3b^2}{5\pi} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{37b^2}{120} (k^2 + k'^2) - \frac{1}{5} b^2 \|k \cdot \|k' \right] \\ &- \left(\frac{4b^2}{3\pi} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{25}{24} b^2 (k^2 + k'^2) - 2b^2 \|k \cdot \|k' \right] \end{aligned}$$

(V.10a)

Como estamos interessados no movimento relativo dos dois núcleos, devemos subtrair os seguintes termos do núcleo de energia.

- a) a energia cinética do centro de massa, T_{CM}
- b) a energia cinética interna dos núcleos ${}^3\text{He}$ e ${}^4\text{He}$, $T_{{}^3\text{He}}$ e $T_{{}^4\text{He}}$
- c) a energia potencial interna de cada um dos núcleos, $V_{{}^3\text{He}}$ e $V_{{}^4\text{He}}$

Teremos então para o movimento relativo dos núcleos, a equação

$$\int \{ T(\|k, \|k') + V(\|k, \|k') - E N(\|k, \|k') \} g(\|k') d\|k' = 0 \quad (\text{V.11})$$

onde E = energia relativa

$$T(l_k, l_k') = \frac{7}{12} b^2 l_k^2 \delta(l_k - l_k') + \left(\frac{3b^2}{7\pi} \right)^{3/2} \left\{ \begin{aligned} & 3 \left(\frac{28}{17} \right)^{3/2} \left[\frac{3}{2} - \frac{12}{17} b^2 (l_k^2 + l_k'^2) + \frac{10}{17} b^2 l_k \cdot l_k' \right] \exp \left[-\frac{169b^2}{17 \times 24} (l_k^2 + l_k'^2) + \frac{10}{17} b^2 l_k \cdot l_k' \right] \\ & - 3 \left(\frac{7}{5} \right)^{3/2} \left[\frac{3}{2} - \frac{6}{5} b^2 (l_k^2 + l_k'^2) - \frac{b^2}{5} l_k \cdot l_k' \right] \exp \left[-\frac{109b^2}{120} (l_k^2 + l_k'^2) - \frac{b^2}{5} l_k \cdot l_k' \right] \\ & + \left(\frac{28}{9} \right)^{3/2} \left[\frac{3}{2} - \frac{4}{3} b^2 (l_k^2 + l_k'^2) - 2b^2 l_k \cdot l_k' \right] \exp \left[-\frac{25}{24} b^2 (l_k^2 + l_k'^2) - 2b^2 l_k \cdot l_k' \right] \end{aligned} \right\} \quad (V.12)$$

Expressões explícitas para o núcleo de energia $\langle \mathbf{d} | \mathbf{H} | \mathbf{d}' \rangle$ e para a energia potencial nuclear $V(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$, sem os termos intrínsecos, são dadas nos Apêndices A e B, respectivamente.

A decomposição em ondas parciais é feita utilizando as expansões (II-35) e (II-36) no espaço dos momentos, e a equação resultante é da forma:

$$(q^2 - k'^2) g_e(k) = \frac{2\mu}{\pi^2} \int_0^\infty w_e(k, k') g_e(k') k'^2 dk' \quad (V.12)$$

onde

$$W_\ell(k, k') = \Theta_\ell(k, k') + V_\ell(k, k') - E V_\ell(k, k') + \chi_\ell(k, k') \quad (\text{V.13})$$

$$\begin{aligned}
 \Theta_\ell(k, k') = & 4\pi (-1)^\ell \frac{\pi^2}{2\mu b^2} \left\{ \right. \\
 & \left(\frac{12b^2}{17\pi} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{169}{408} b^2 (k^2 + k'^2) \right] \left[\left(4,5 - \frac{36}{17} b^2 (k^2 + k'^2) \right) i_\ell \left(\frac{10b^2 k k'}{17} \right) \right. \\
 & + \frac{90b^2 k k'}{17(2\ell+1)} \left[(\ell+1) i_{\ell+1} \left(\frac{10b^2 k k'}{17} \right) + \ell i_{\ell-1} \left(\frac{10b^2 k k'}{17} \right) \right] \left. \right] \\
 & - \left(\frac{3b^2}{5\pi} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{37b^2}{120} (k^2 + k'^2) \right] \left[\left(4,5 - \frac{18}{5} b^2 (k^2 + k'^2) \right) i_\ell \left(\frac{b^2 k k'}{5} \right) \right. \\
 & + \frac{9}{5} \frac{b^2 k k'}{(2\ell+1)} \left[(\ell+1) i_{\ell+1} \left(\frac{b^2 k k'}{5} \right) + \ell i_{\ell-1} \left(\frac{b^2 k k'}{5} \right) \right] \left. \right] \\
 & + \left(\frac{4b^2}{3\pi} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{25}{24} b^2 (k^2 + k'^2) \right] \left[\left(\frac{3}{2} - \frac{4}{3} b^2 (k^2 + k'^2) \right) i_\ell (2b^2 k k') \right. \\
 & \left. \left. + \frac{6k k'}{(2\ell+1)} \left[(\ell+1) i_{\ell+1} (2b^2 k k') + \ell i_{\ell-1} (2b^2 k k') \right] \right] \right\} \quad (V.14)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_\ell(k, k') = & \left\{ -\frac{12}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{12b^2}{17} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{169}{24 \times 17} b^2 (k^2 + k'^2) \right) i_\ell \left(\frac{10b^2 k k'}{17} \right) \right. \\
 & + \frac{12}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{3b^2}{5} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{37b^2}{120} (k^2 + k'^2) \right) (-1)^\ell i_\ell \left(\frac{b^2 k k'}{5} \right) \\
 & \left. - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{4b^2}{3} \right)^{3/2} \exp \left(-\frac{25b^2}{24} (k^2 + k'^2) \right) (-1)^\ell i_\ell (2b^2 k k') \right\} \quad (V.15)
 \end{aligned}$$

onde $i_\ell(x)$ é a função de Bessel esférica modificada [AS 70].

$V_\ell(k, k')$ é o potencial nuclear na onda parcial ℓ . Uma expressão analítica para esse potencial é dada no Apêndice C.

$x_\ell(k, k')$ é o potencial coulombiano, introduzido na representação de momentos, sem levar em conta os termos de troca:

$$\chi_\ell(k, k') = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty I_\ell(k, k') k'^2 j_\ell(k') dk' \quad (\text{V.16})$$

onde $I_\ell(k, k') = \int_0^\infty j_\ell(kR) j_\ell(k'R) V_c(R) R^2 dR$

e $j_\ell(x)$ é a função de Bessel esférica de ordem ℓ .

Devido à particularidade do método utilizado para o cálculo da defasagem (veja a condição V.21) adotamos o potencial coulombiano truncado, utilizado no trabalho de Lumbroso [Lu 74].

$$V_c(R) = \begin{cases} \frac{z^2 e^2}{R} & \text{para } R \leq R_0 \\ 0 & \text{para } R > R_0 \end{cases} \quad (\text{V.17})$$

Para levar em conta o efeito do termo de longo alcance do potencial coulombiano que foi desprezado na equação (V.17), as defasagens são corrigidas com o termo

$$\gamma \ln(2kR_0) \quad (\text{V.18})$$

onde $\gamma = z^2 e^2 / \hbar v$

e v é a velocidade da partícula incidente.

A integral $I_\ell(k, k')$ é truncada em $R_0 = 30 \text{ fm}$, e calculada com o método de integração numérica de Gauss Legendre de 32 pontos para cada um dos intervalos seguintes: $(0,0 \text{ a } 1,15 \text{ fm}), (1,15 \text{ a } 2,3 \text{ fm}), (2,3 \text{ a } 6,0 \text{ fm}), (6,0 \text{ a } 14,0 \text{ fm})$ e $(14,0 \text{ a } 30,0 \text{ fm})$.

V.C - MÉTODO DE FREDHOLM PARA CÁLCULO DAS DEFASAGENS E ESTADOS LIGADOS

As defasagens do espalhamento nuclear são obtidas através do Método de Fredholm desenvolvido por Schwinger [Sc 54] e Baker [Ba 58] e utilizado por Jost e Pais [JP 51] e Reinhardt e Szabo [RS 70] para cálculos de defasagens no espalhamento de uma partícula por um potencial. Esse método foi utilizado também por Lumbroso [Lu 74] no estudo do espalhamento α - α pelo MCG. No livro de Gottfried [Go 66] o método é apresentado com todos os detalhes, de modo que aqui nos limitaremos a uma breve revisão do método, atendo mais aos aspectos técnicos de sua utilização.

O determinante de Fredholm para o problema de espalhamento é

$$D_\ell(z) = \det [1 - G_\ell^0(z) W_\ell(z)] \quad (\text{V.19})$$

onde $G_\ell^0(z)$ é a função de Green para partícula livre e $W_\ell(z)$ é o potencial não local definido na equação (V.12) na representação de energia. A relação entre $D_\ell(z)$ e a defasagem $\delta(E)$ pode ser explicitada através da equação:

$$\frac{D_\ell(\epsilon + i\delta)}{D_\ell(\epsilon - i\delta)} = e^{-2i\delta(E)} \quad (\text{V.20})$$

Para potenciais que satisfazem as condições

$$\lim_{r \rightarrow 0} r^2 V(r) = 0 \quad (\text{V.21})$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} r V(r) = 0$$

o determinante de Fredholm $D_\ell(z)$ pode ser escrito como

$$D_\ell(z) = 1 + \int \frac{A_\ell(E)}{z - E} dE \quad (V.22)$$

onde a função espectral $A_\ell(E)$ é definido como

$$\begin{aligned} A_\ell(E) &= \frac{1}{2\pi i} [D_\ell(E-i\varepsilon) - D_\ell(E+i\varepsilon)] \\ &= \frac{1}{\pi} D_\ell(E+i\varepsilon) e^{i\delta(E)} \operatorname{sen} \delta(E) \end{aligned} \quad (V.23)$$

Usando a identidade:

$$\lim_{z \rightarrow x \pm i\varepsilon} \frac{1}{\pi} \int_a^b \frac{f(x') dx'}{z - x'} = \mp i f(x) + \mathcal{P} \int_a^b \frac{f(x') dx'}{x - x'} \quad (V.24)$$

podemos escrever

$$D_\ell(E+i\varepsilon) = 1 - i\pi A_\ell(E) + \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{A_\ell(E') dE'}{E - E'} \quad (V.25)$$

Onde o símbolo \mathcal{P} , significa valor principal da integral.

Portanto:

$$A_\ell(E) = -\frac{i}{\pi} \operatorname{Im} D_\ell(E+i\varepsilon) \quad (V.26)$$

$$\operatorname{Re} D_\ell(E+i\varepsilon) = 1 + \mathcal{P} \int_0^\infty \frac{A_\ell(E') dE'}{E - E'} \quad (V.27)$$

Combinando as equações (V.20), (V.23) e lembrando que $D_\ell^*(z) = D_\ell(z^*)$, obtemos

$$\lg \delta_\ell(\varepsilon) = \frac{\pi A_\ell(\varepsilon)}{\operatorname{Re} D_\ell(\varepsilon + i\varepsilon)} \quad (\text{V.28})$$

Utilizando a relação (V.26) podemos escrever

$$\lg \delta_\ell(\varepsilon) = - \frac{\operatorname{Im} D_\ell(\varepsilon + i\varepsilon)}{\operatorname{Re} D_\ell(\varepsilon + i\varepsilon)} \quad (\text{V.29})$$

Os estados ligados podem ser encontrados impondo-se a condição

$$D_\ell(-E_b) = 0$$

ou equivalentemente

$$1 - \int_0^\infty \frac{A_\ell(E') dE'}{E' + E_b} = 0 \quad (\text{V.30})$$

Pode-se mostrar [Go 66] que $D_\ell(z)$ pode ser escrito como uma expansão

$$\begin{aligned} D_\ell(z) &= 1 - \int_0^\infty \frac{dE_1 W_{11}^\ell}{z - E_1} + \frac{1}{2!} \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{dE_1 dE_2}{(z - E_1)(z - E_2)} \begin{vmatrix} W_{11}^\ell & W_{12}^\ell \\ W_{21}^\ell & W_{22}^\ell \end{vmatrix} + \dots \\ &+ \frac{1}{n!} \int_0^\infty \dots \int_0^\infty \frac{dE_1 \dots dE_n}{(z - E_1) \dots (z - E_n)} \begin{vmatrix} W_{11} & W_{12} \dots W_{1n} \\ \vdots & \\ W_{n1} & \dots \dots W_{nn} \end{vmatrix} + \dots \end{aligned} \quad (\text{V.31})$$

$$W_{ij} = \langle i | W | j \rangle =$$

onde

$$= \left(\frac{2\mu}{\pi a^2} \right) \sqrt{k_i k_j} \int_0^\infty r^2 dr j_e(k_i r) j_e(k_j r) V(r) \quad (\text{V.32})$$

com

$$k_i = \sqrt{\frac{2\mu E_i}{\hbar}}$$

(V.33)

Comparando as equações (V.31) e (V.22), obtemos a expansão para a função espectral $A_\ell(E)$, com $k_0 = \sqrt{\frac{2\mu E}{\hbar}}$

$$A_\ell(E) = A_\ell(k_0) =$$

$$= -W_{00} + \dots + \frac{(-1)^{n+1}}{n!} (2)^n P \int_0^\infty \frac{k_1 \dots k_n dk_1 \dots dk_n}{(k_0^2 - k_1^2) \dots (k_0^2 - k_n^2)} \begin{vmatrix} W_{00} & \dots & W_{0n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{n0} & \dots & W_{nn} \end{vmatrix} + \dots \quad (V.34)$$

e para o denominador da eq. (V.29)

$$\operatorname{Re} D_\ell(E + i\varepsilon) = 1 + \dots$$

$$\dots + \frac{(-1)^n (2)^n}{n!} P \int_0^\infty \frac{k_1 \dots k_n dk_1 \dots dk_n}{(k_0^2 - k_1^2) \dots (k_0^2 - k_n^2)} \begin{vmatrix} W_{11} & \dots & W_{1n} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{n1} & \dots & W_{nn} \end{vmatrix} + \dots \quad (V.35)$$

Utilizando técnicas numéricas para cada uma das integrais que aparecem na expansão, substituimos

$$P \int \frac{k dk f(k)}{k_0^2 - k^2} \text{ pela soma } \sum_{i=1}^N \frac{k_i f(k_i) w_i}{k_0^2 - k_i^2} \quad (V.36)$$

onde os N pontos k_i são os pontos do Método de quadratura numérica de Gauss-Legendre de N pontos e w_i são os pesos associados. A região próxima dos pontos de singularidade dos integrandos são varridos por um intervalo simétrico. Dessa forma, a malha utilizada no cálculo da defasagem foi a seguinte: método de Gauss-Legendre.

dre de 8 pontos para cada um dos seis intervalos $(0, 0 \text{ a } k_0)$, $(k_0 \text{ a } 2k_0)$, $(2k_0 \text{ a } 3k_0)$, $(3k_0 \text{ a } 5,0 \text{ fm}^{-1})$, $(5,0 \text{ a } 10,0 \text{ fm}^{-1})$ e $(10,0 \text{ a } 30,0 \text{ fm}^{-1})$.

As expansões (V.34) e (V.35) podem ser reescritas como

$$A_\epsilon(k_0) = \begin{vmatrix} -W_{00} & -\frac{2W_{01}\omega_1 k_1}{k_0^2 - k_1^2} & \dots & \dots & -\frac{2W_{0N}\omega_N k_N}{k_0^2 - k_N^2} \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ -\vdots & -\vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ -W_{N0} & & & \text{Re } D_\epsilon(\epsilon + i\epsilon) & \end{vmatrix}$$

(V.37)

$$\text{Re } D_\epsilon(\epsilon + i\epsilon) =$$

$$= \begin{vmatrix} 1 - \frac{2W_{11}\omega_1 k_1}{k_0^2 - k_1^2} & -\frac{2W_{12}\omega_2 k_2}{k_0^2 - k_2^2} & \dots & \dots & -\frac{2W_{1N}\omega_N k_N}{k_0^2 - k_N^2} \\ -\frac{2W_{21}\omega_1 k_1}{k_0^2 - k_1^2} & 1 - \frac{2W_{22}\omega_2 k_2}{k_0^2 - k_2^2} & \dots & \dots & -\frac{2W_{2N}\omega_N k_N}{k_0^2 - k_N^2} \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & & \vdots \\ -\frac{2W_{N1}\omega_1 k_1}{k_0^2 - k_1^2} & \dots & \dots & \dots & 1 - \frac{2W_{NN}\omega_N k_N}{k_0^2 - k_N^2} \end{vmatrix}$$

(V.38)

Para testar o programa da defasagem, reproduzimos os resultados obtidos por Reinhardt e Szabo [RZ 70]. Calculamos também a defasagem coulombiana com o termo do potencial contendo apenas o termo coulombiano, definido pela equação (V.17) e somamos à defasagem o termo de correção dada pela equação (V.18). Para a onda parcial $\ell = 0$, para energias (do laboratório) menores do que 9,0 MeV utilizamos uma malha mais densa para baixos momentos: $(0,0 \text{ a } 0,5 k_0)$ $(0,5 k_0 \text{ a } k_0)$ $(k_0 \text{ a } 1,5 k_0)$ $(1,5 k_0 \text{ a } 3,0 k_0)$ $(3,0 k_0 \text{ a } 5,0 \text{ fm}^{-1})$ $(5,0 \text{ a } 30 \text{ fm}^{-1})$. A comparação com a defasagem coulombiana exata, definida pela função de Euler, $\Gamma(\ell + 1 + i\gamma)$, mostrou um desvio em média de 4% ao longo do intervalo de energia calculada (5,0 a 18,0 MeV), para as ondas parciais de 0 a 3.

No cálculo dos estados ligados, como não existe singularidade no integrando, utilizamos uma malha que não depende da energia: método de Gauss-Legendre de 8 pontos de $(0,0 \text{ a } 1,0 \text{ fm}^{-1})$, $(1,0 \text{ a } 2,0 \text{ fm}^{-1})$ e $(2,0 \text{ a } 20,0 \text{ fm}^{-1})$. Nesse caso, o teste do programa foi feito com o potencial delta e o potencial separável de Yamaguchi [Ya 54]. Em todos os casos obtivemos uma boa concordância com os cálculos exatos (coincidentes até à quarta casa decimal).

Todos os cálculos numéricos deste trabalho foram feitos com o computador IBM/4341 da UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA.

V.D - RESULTADOS PARA OS POTENCIAIS DE SKYRME III E IV

Existem na literatura vários conjuntos de parâmetros para o potencial do tipo Skyrme.

Neste trabalho os primeiros cálculos foram feitos com os potenciais de Skyrme III e IV que foram utilizados no estudo das propriedades nucleares em cálculos autoconsistente para núcleos par-par (^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{56}Zr , ^{140}Ce e ^{208}Pb) [BFG 75]; para núcleos ímpares ($7 \leq A \leq 20$) [Pa 76]; vibrações monopolares e dipolares pelo método de coordenadas geradoras (^4He , ^{16}O , ^{40}Ca) [FV 76, GP 81, PC 81].

Os parâmetros das forças SIII e SIV são dados na Tabela I

	t_0 [MeV.fm ³]	t_1 [MeV.fm ⁵]	t_2 [MeV.fm ⁵]	t_3 [MeV.fm ⁶]	W_0 [MeV.fm ⁵]	x_0
S III	-1128.75	395.0	-95.0	14000.0	120.0	0.45
S IV	-1205.6	765.0	35.0	5000.0	150.0	0.05

TABELA I - Parâmetros das interações S III e S IV

Para o parâmetro do oscilador b , usamos o valor 1,36 fm, que ajusta o raio quadrático médio da partícula α em 1,44 fm, usado na referência [Lu 74].

As defasagens do espalhamento nuclear, após subtração da contribuição coulombiana, para as ondas parciais $\ell = 0, 1, 2$ e 3 estão nas Figuras 1 (ondas parciais $S_{1/2}$, $P_{1/2}$ e $D_{3/2}$), 2 (ondas parciais $P_{3/2}$ e $D_{5/2}$) e 3 (ondas parciais $F_{7/2}$ e $F_{5/2}$) para o potencial S III e nas Figuras 4 (ondas parciais $S_{1/2}$, $P_{1/2}$, $P_{3/2}$, $D_{3/2}$ e $D_{5/2}$) e 5 (ondas parciais $F_{7/2}$ e $F_{5/2}$) para o potencial S IV. Os pontos experimentais foram extraídos da referência [ST 67].

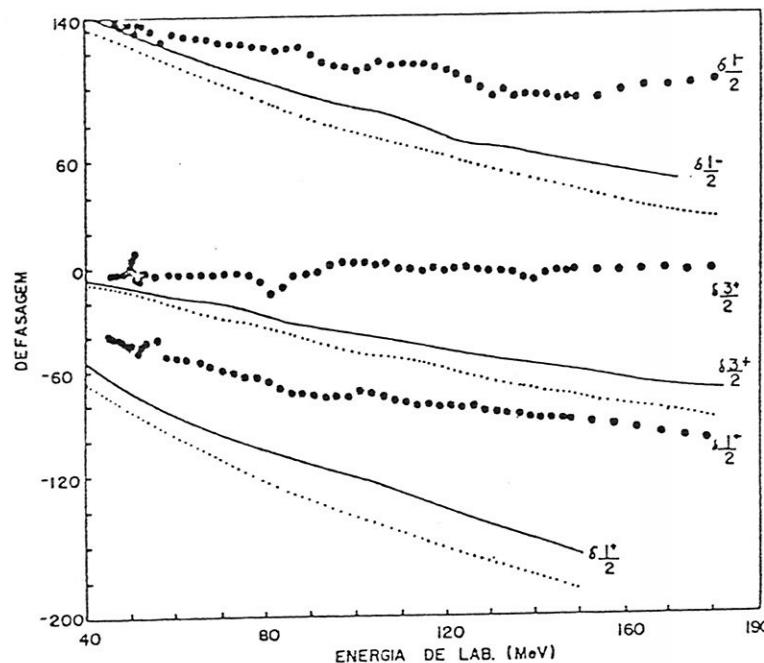


Figura 1. Defasagens $S_{1/2}$, $P_{1/2}$ e $D_{3/2}$ calculadas com o potencial Skyrme III com $b = 1,36$ fm (linhas cheias) e $b = 1,56$ fm (linhas pontilhadas). Os círculos fechados são dados experimentais [ST 67] para $j = l - \frac{1}{2}$

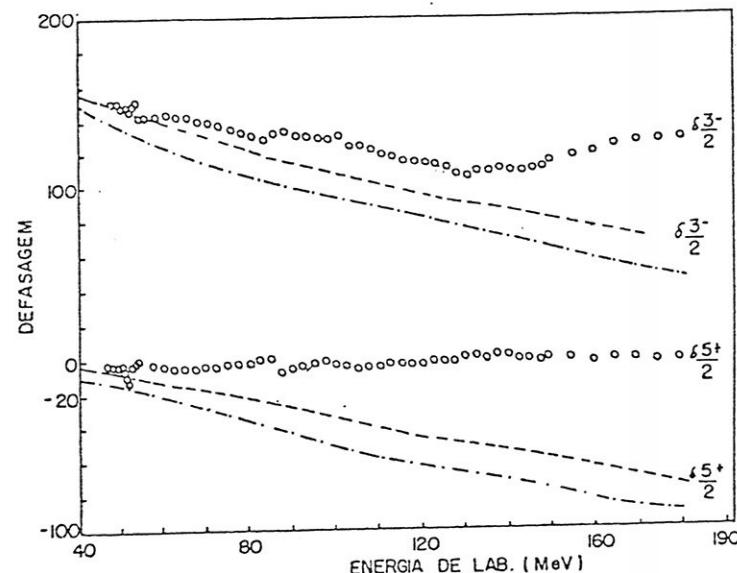


Figura 2. Defasagens $P_{3/2}$ e $D_{5/2}$ calculadas com o potencial Skyrme III com $b = 1,36$ fm (linhas tracejadas) e $b = 1,56$ fm (linhas traço-ponto). Os círculos abertos são dados experimentais da referência [ST 67] para $j = l + \frac{1}{2}$

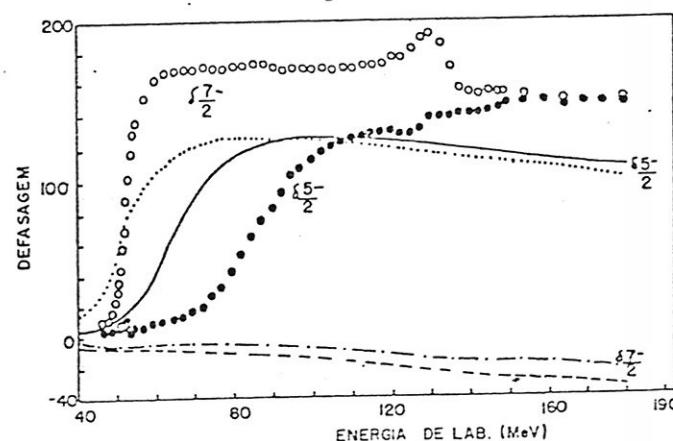


Figura 3. Defasagens $F_{5/2}$ e $F_{7/2}$ calculadas com o potencial Skyrme III com $b = 1,36$ fm (linhas cheias e tracejadas) e $b = 1,56$ fm (linhas pontilhadas e traço ponto). Os círculos abertos são dados experimentais [ST 67] para $j = l + \frac{1}{2}$ e os círculos fechados para $j = l - \frac{1}{2}$.

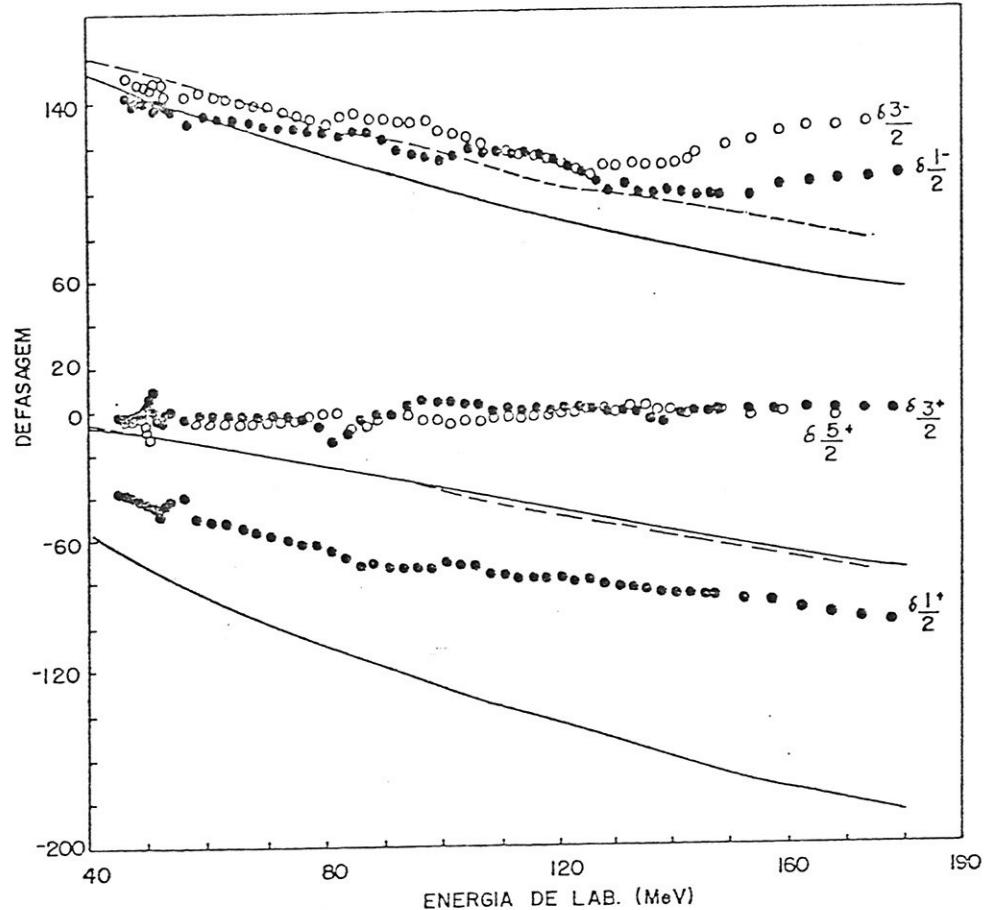


Figura 4. Defasagens das ondas parciais $\ell \leq 2$ calculadas com o potencial Skyrme IV e $b = 1,36$ fm. Os círculos fechados e as linhas cheias correspondem a $j = \ell - \frac{1}{2}$ e os círculos abertos e linhas tracejadas a $j = \ell + \frac{1}{2}$. Os dados experimentais foram extraídos da referência [ST 67].

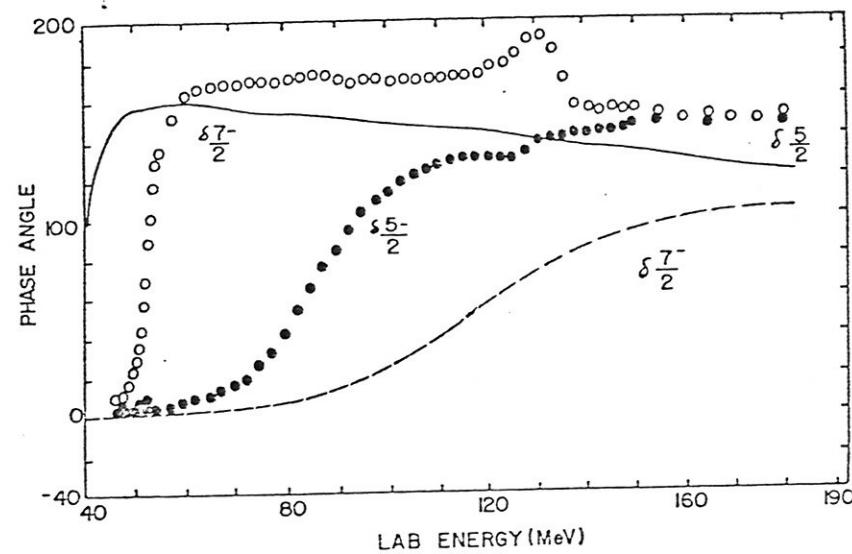


Figura 5. Defasagens $F_{7/2}$ e $F_{5/2}$ calculadas com o potencial Skyrme IV, ($b = 1,36$ fm). Os círculos fechados e as linhas cheias correspondem a $j = \ell - \frac{1}{2}$ e os círculos abertos e linhas tracejadas a $j = \ell + \frac{1}{2}$. Os dados experimentais foram extraídos da referência [ST 67].

Observamos um desvio em relação aos dados experimentais para as ondas parciais S, P e D que indicam um potencial mais repulsivo do que a experiência requer e uma discrepância considerável em relação às ressonâncias na onda F.

As energias de ligação dos dois primeiros estados do ^7Be estão na Tabela II, juntamente com os valores experimentais.

Estados	E(S III)	E(S IV)	Valor Experimental
$P_{3/2}$	2.96	5.92	1.59
$P_{1/2}$	1.87	4.23	1.16

Tabela II - Energia de ligação, em MeV, do estado fundamental ($P_{3/2}$) e do 1º estado excitado ($P_{1/2}$) do ^7Be , calculados com as interações Skyrme III e IV.

Embora inadequados, os resultados favorecem a interação S III.

Para analisar a origem desses resultados discrepantes calculamos variacionalmente as energias de ligação dos fragmentos ^3He e α com cada um dos dois conjuntos de parâmetros de Skyrme.

Aproximações variacionais para os valores da energia de ligação, com funções de onda de oscilador, são dadas pela fórmula de Skyrme [Sk 56]

$$E = A \frac{\hbar^2}{2mb^2} + \frac{6}{(2\pi b)^{3/2}} \left[B_0 \frac{1}{b} + B_1 \frac{1}{b} \frac{3}{2b^2} + B_2 \frac{1}{b} \frac{5}{2b^2} \right]$$

$$+ \frac{4B_3 \frac{1}{b}}{(\pi b^2 \sqrt{3})^3} \quad (\text{V.39})$$

As constantes dessa fórmula e os valores das energias de ligação (em MeV) dos fragmentos ^3He e α calculados com as interações S III e S IV, estão na tabela III, junto com os valores experimentais das energias de ligação dos núcleos citados acima, com a correção coulombiana, considerando esferas carregadas uniformemente ($b = 1,36 \text{ fm}$).

	A	B_0	B_1	B_2	B_3
^3He	3	1/2	1/2	0	3/8
^4He	9/2	1	1	0	1/4
<hr/>					
ENERGIA DE LIGAÇÃO [MeV]		S III	S IV	EXPER.	
^3He		-6,70	-3,04	-8,48	
α		-16,61	-18,13	-29,41	

Tabela III - Constantes da fórmula de Skyrme (V.39), com o termo t_3 para ^3He , calculado com a equação (V.5b), e energias de ligação dos núcleos ^3He e α , calculados com a interação S III e S IV, e os valores experimentais com correção coulombiana, para parâmetro do oscilador igual a 1,36 fm.

A constante B_3 do núcleo ^3He , da Tabela III, difere do valor dado por Skyrme [Sk 56] porque o nosso cálculo foi feito com o termo t_3 dependente da densidade, equação (V.5b), ao passo que Skyrme calculou segundo a equação (V.5a).

A Tabela III, mostra que as interações S III e S IV não reproduzem os valores da energia de ligação para os núcleos α e ^3He .

Os resultados dessa tabela foram obtidos com o valor fi

xado a priori do parâmetro do oscilador, e não correspondem a mínimos variacionais. Isso se verifica de fato, fazendo uma curva de energia de ligação dada pela fórmula de Skyrme (V.39) versus parâmetro do oscilador para os núcleos ^3He e α com as interações S III e S IV (Figs. 6 e 7). Por exemplo a Fig. 7 mostra que com a interação S IV, obtemos um mínimo variacional próximo à energia de ligação do ^3He para $b \approx 1,60 \text{ fm}$.

Portanto, as interações S III e S IV não satisfazem as condições de estabilidade para a energia de ligação dos núcleos α e ^3He , exigidas por Kajino, Matsuse e Arima [KMA 84] para reproduzir dados do espalhamento e a estrutura de aglomerado do ^7Be , na região de baixa energia, com o parâmetro do oscilador $b = 1,36 \text{ fm}$. Por outro lado, como os pontos de mínimos são próximos para α e ^3He nas duas interações, calculamos as defasagens para a interação S III com o parâmetro do oscilador $b = 1,56 \text{ fm}$ que corresponde aproximadamente aos mínimos comuns aos dois fragmentos com energias de ligação -26,0 MeV e -9,6 MeV para α e ^3He respectivamente. Os resultados desse cálculo estão nas Figuras 1, 2 e 3, e mostram que os desvios em relação aos dados experimentais ficaram maiores se comparados com os valores calculados com $b = 1,36 \text{ fm}$.

Como os parâmetros dessas duas interações foram, na realidade, escolhidos para ajustar a energia de ligação e o raio da distribuição de carga dos núcleos par-par (^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca , ^{56}Ni , ^{90}Zr , ^{140}Ca e ^{208}Pb) não é surpreendente o insucesso da extração de seu uso para fragmentos muito mais leves.

Resultados melhores que os obtidos com os potenciais S III e S IV, podem porém ser obtidos com uma escolha dos parâmetros de Skyrme especificamente adaptada a uma descrição melhor dos fragmentos aqui envolvidos.

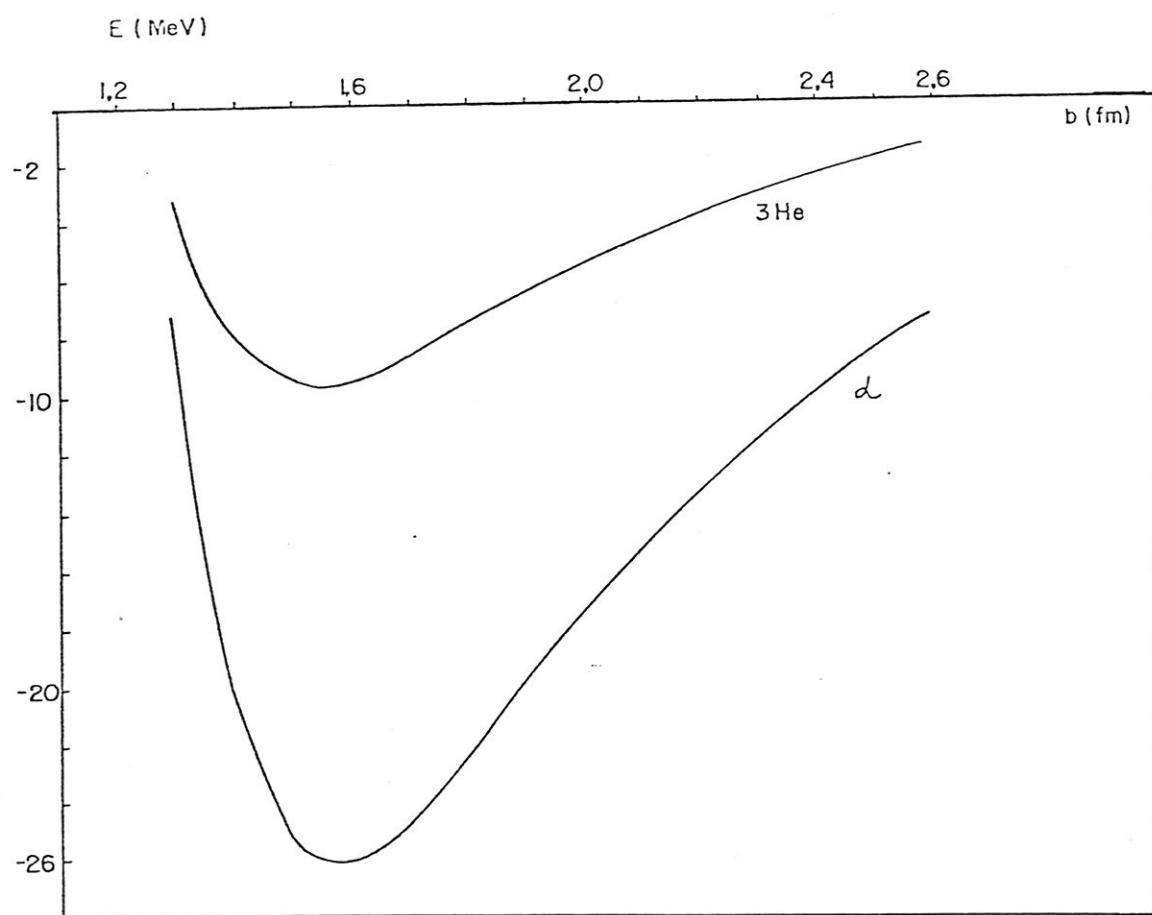


Figura 6. Energia de ligação do $^3\text{He}(\alpha)$ versus parâmetro do oscilador, para a interação S III.

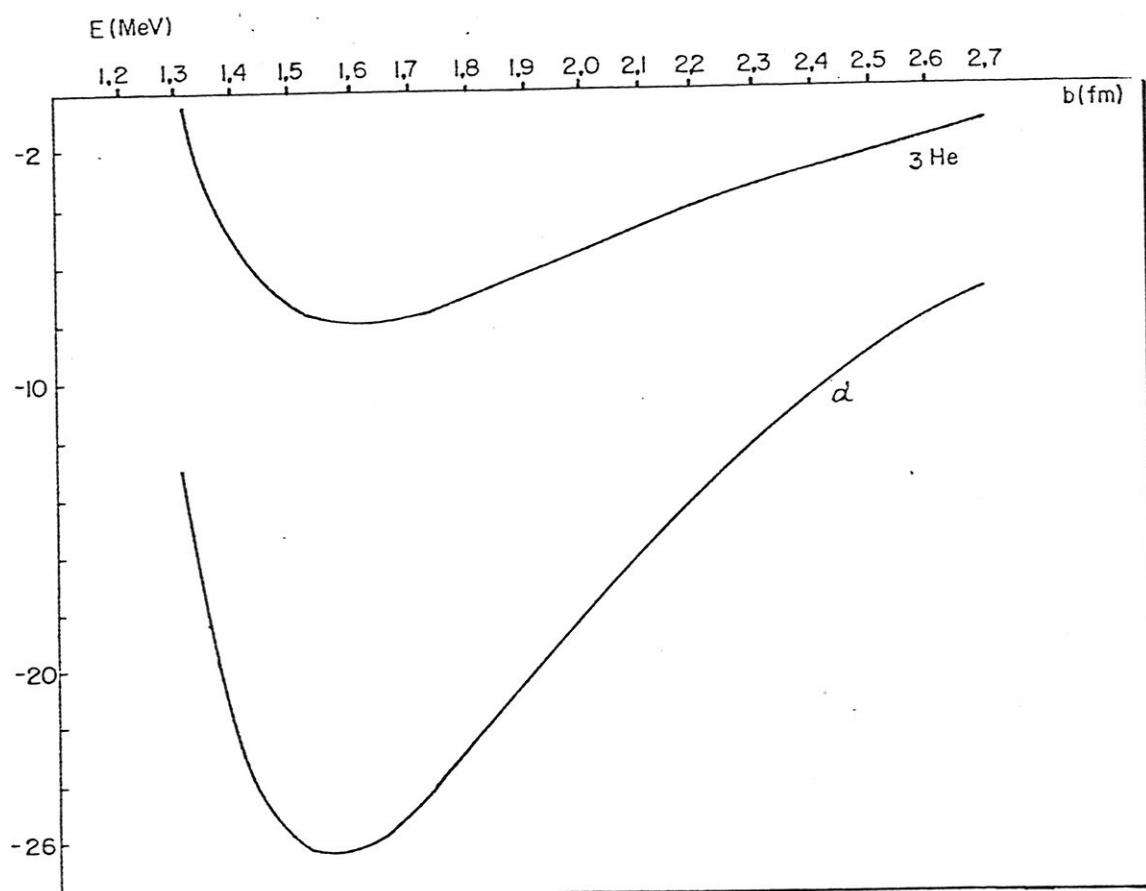


Figura 7. Energia de ligação do $^3\text{He}(\alpha)$ versus parâmetro do oscilador, para a interação S IV.

V.E - PARÂMETROS DE SKYRME PARA ESPALHAMENTO ${}^3\text{He}-\alpha$

Para escolher um novo conjunto de parâmetros para o potencial de Skyrme, vamos impor as seguintes condições de estabilidade para a energia de ligação dos núcleos α e ${}^3\text{He}$.

$$E_b({}^3\text{He}) = -8,48 \text{ MeV}$$

$$\frac{\partial E_b({}^3\text{He})}{\partial b} \Big|_{b=b^3\text{He}} = 0$$

$$E_b(\alpha) = -29,41 \text{ MeV}$$

(V.40)

$$\frac{\partial E_b(\alpha)}{\partial b} \Big|_{b=b_\alpha} = 0$$

onde E_b é dado pela equação (V.39).

Exigiremos também que os parâmetros do oscilador do ${}^3\text{He}$ e α sejam iguais, isto é,

$$b_{{}^3\text{He}} = b_\alpha$$

Resolvendo o sistema de equações (V.40) obtemos os seguintes valores para os parâmetros b , t_0 , t_1 e t_3

$$b = 1,30 \text{ fm}$$

$$t_0 = -828,78 \text{ MeV fm}^3$$

$$t_1 = 222,35 \text{ MeV fm}^5$$

$$t_3 = 4746,40 \text{ MeV fm}^6$$

O parâmetro t_2 não é fixado pelas condições (V.40).

Considerando $t_2 = 0$, obtemos um estado excessivamente ligado para ${}^7\text{Be}$ (~ 8 MeV). Ajustamos então, os parâmetros t_2 e w_0 para reproduzir a energia de ligação dos dois estados ligados do ${}^7\text{Be}$: $P_{3/2}$ (1,60 MeV) e $P_{1/2}$ (1,06 MeV). Os valores assim ajustados são:

$$t_2 = -12,0 \text{ MeV fm}^5$$

$$w_0 = 40,0 \text{ MeV fm}^5$$

Chamaremos esse potencial de SAH (Skyrme Alfa-Hélio).

Comparando os parâmetros do potencial SAH com os dos potenciais S III e S IV verificamos que: t_3 é do tipo S IV, t_1 e t_2 são do tipo S III. Isto mostra que a matéria nuclear para o potencial SAH, tem uma dependência da densidade pequena (no sentido de S IV) e não localidade relativamente fraca (massa efetiva para o potencial SAH é igual a 0,77, comparada com a massa efetiva para S IV que é igual a 0,45). Qualitativamente é razoável obtermos estes resultados para sistemas muito leves, já que os efeitos acima citados são de muitos corpos.

As defasagens calculadas com o novo conjunto de parâmetros (potencial SAH) estão nas Figuras 8 e 9.

As ressonâncias $F_{7/2}$ e $F_{5/2}$ aparecem agora na ordem correta e com uma sensível melhora nos valores da energia de ressonância.

O desvio que observamos nas ondas parciais S, P e D, que são características do potencial de Skyrme, independente do conjunto de parâmetros que utilizamos, mostra que devemos alterar a estrutura dessa interação. O caráter excessivamente repulsivo dos potenciais de Skyrme deve ser atribuído ao comportamento inadequado dos termos t_0 , t_1 e t_2 em relação ao momento relativo, o que já foi observado por Gogny [Go 75] que sugeriu uma modifica-

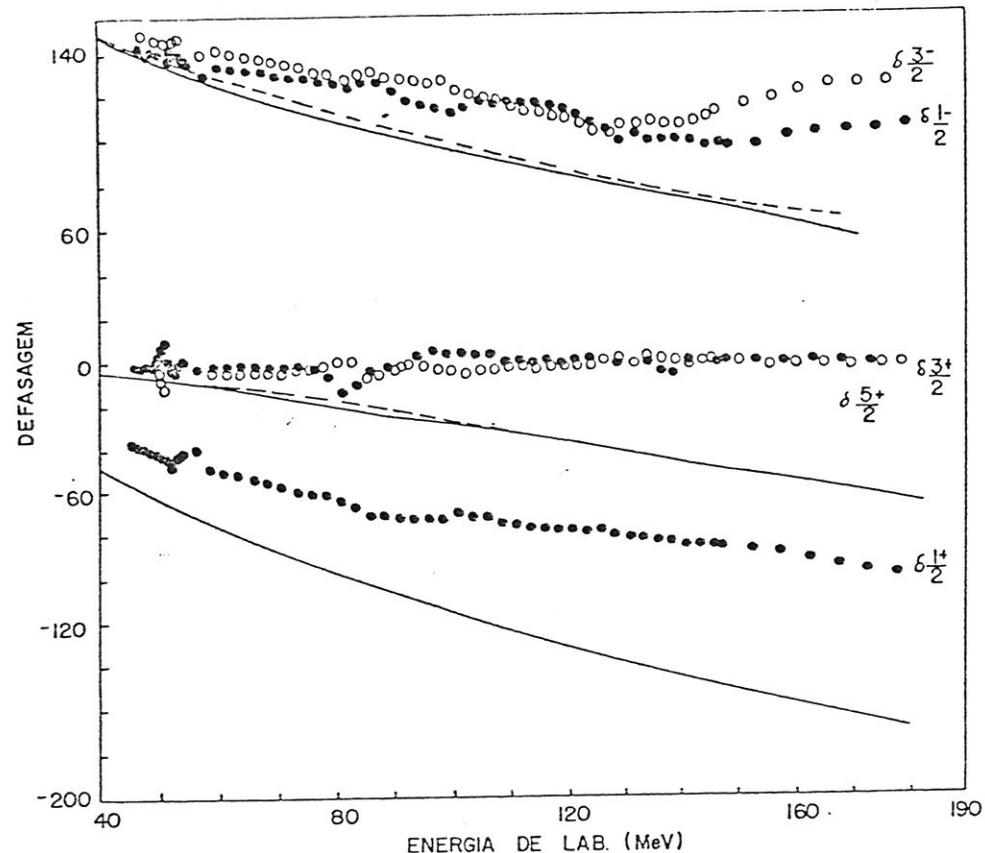


Figura 8. Defasagens das ondas parciais $\ell \leq 2$ calculadas com o potencial SAH e $b = 1,30$ fm. Os círculos fechados e as linhas cheias correspondem a $j = \ell - \frac{1}{2}$ e os círculos abertos e linhas tracejadas a $j = \ell + \frac{1}{2}$. Os dados experimentais foram extraídos da referência [ST 67].

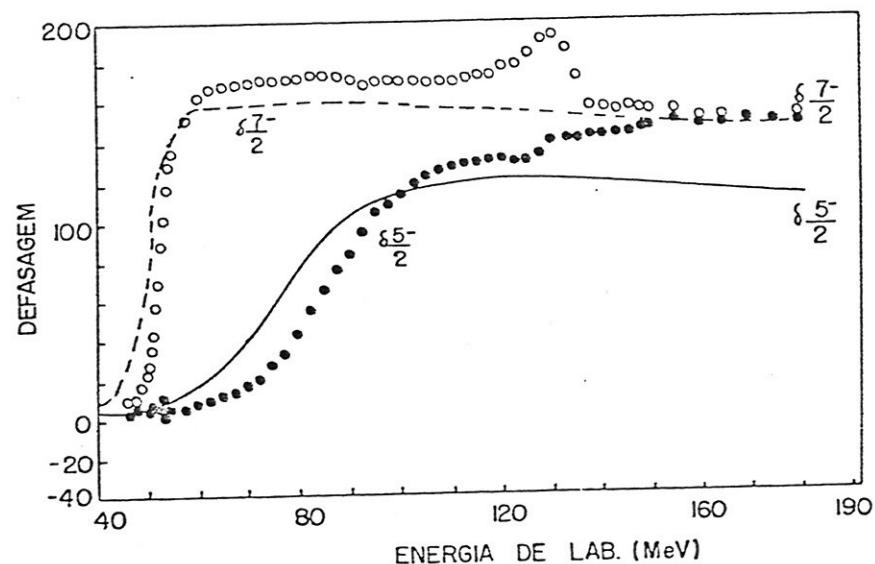


Figura 9. Defasagens $F_{7/2}$ e $F_{5/2}$ calculadas com o potencial SAH ($b = 1,30$ fm). Os círculos fechados e as linhas cheias correspondem a $j = \ell - \frac{1}{2}$ e os círculos abertos e linhas tracejadas à $j = \ell + \frac{1}{2}$. Os dados experimentais foram extraídos da referência [ST 67].

ção que altera o alcance desse potencial já que potenciais com al-cance finito tendem a zero para momentos relativos altos.

No último capítulo apontamos vários efeitos que não foram levados em conta nesse trabalho e que podem melhorar esses re-sultados, principalmente na região de energia de laboratório maior que 7,0 MeV, quando o efeito do canal $p-^6Li$ não é desprezível.

CAPÍTULO VI

CONCLUSÃO

Neste trabalho estudamos o sistema de massa 7 através de uma descrição unificada dos estados ligados e das defasagens do espalhamento elástico. Ainda, dentro do formalismo utilizado mostramos como proceder para conseguir a diagonalização exata do núcleo de superposição (não gaussiano) e estabelecemos a equivalência completa entre o MCG e o MGR.

A extensão desse estudo para cálculos com canais acoplados [MP 78, FT 85], onde a descrição correta da energia de ligação dos vários fragmentos envolvidos é relevante, nos induziu à escolha de uma interação nucleon-nucleon efetiva que obteve grande sucesso na reprodução de propriedades nucleares nos cálculos autoconsistentes e do MCG. A interação de Skyrme III e IV mostraram, no entanto, inadequados para a descrição de espalhamento de fragmentos leves. A adoção de prescrições para a escolha de novos parâmetros nos levou a melhorar consideravelmente os seus resultados. Esses parâmetros foram fixados pelas propriedades estáticas dos fragmentos envolvidos e não por um processo específico de ajuste dos dados estudados. As defasagens das ondas parciais $\ell = 0, 1, 2$, e as ressonâncias nas ondas $F_{7/2}$ e $F_{5/2}$ foram reproduzidas satisfatoriamente no intervalo de energia do laboratório de 4,0 a 8,0 MeV.

As discrepâncias observadas para energias mais altas nas ondas parciais com $\ell \leq 2$ podem ser atribuídas a vários fatores que não foram considerados neste trabalho:

- a) No espalhamento ${}^3\text{He}-\alpha$ há emissão de protões à ener-

gia do laboratório de 7,0 MeV, o que implica que o canal $p - {}^6\text{Li}$ deve ser incluído para obtermos uma boa concordância com a experiência para energias superiores ao limiar.

- b) A importância do termo de troca Coulombiana foi estudada por vários autores [RT 70, LST 81] que mostraram que a sua contribuição depende da paridade, isto é, é atrativa para as ondas pares e repulsivas para as ondas ímpares. A não inclusão desse termo, poderia explicar o comportamento mais repulsivo das defasagens das ondas pares em comparação com as ondas ímpares.
- c) O carácter excessivamente repulsivo das defasagens das ondas parciais $\ell \leq 2$ para as energias mais altas para as três interações de Skyrme estudadas sugere ainda a importância possível de modificações estruturais dessa interação. Essa questão já foi analisada por Gogny [Go 75] que propôs a substituição dos termos t_0 , t_1 e t_2 , que têm alcance zero e uma dependência constante, linear e quadrática em momentos relativos, por um outro termo com alcance finito cujos efeitos tendem rapidamente a zero para momentos relativos altos.
- d) Outro fator que não foi levado em conta neste trabalho é a distorção dos fragmentos durante a colisão. Essa questão foi objeto de uma polêmica entre dois grupos de pesquisadores, que estudaram o sistema de sete partículas ${}^3\text{He}({}^3\text{H}) - \alpha$. Kajino, Matsuse e Arima [KMA 84] consideram que o efeito da distorção de

$^3\text{He}(^3\text{H})$ é desprezível na descrição das propriedades de espalhamento e dos estados ligados para energias inferiores à energia do limiar para a dissociação completa do $^3\text{He}(^3\text{H})$, isto é, à energia do centro de massa de 7,7 MeV para o ^3He e 8,5 MeV para o trítio. Uma vez que as condições de estabilidade variacional sejam satisfeitas pelas energias de ligação e raios nucleares dos fragmentos, eles consideram que o MGR convencional (sem efeito de distorção) descreve as propriedades desse sistema que dependem da formação de agregados nucleares (clusterings), tais como: energias de ligação, momentos eletromagnéticos, raios dos núcleos $^7\text{Be}(^7\text{Li})$ e as defasagens do espalhamento α - $^3\text{He}(^3\text{H})$. Observaram porém uma sensível dependência dessas propriedades com a interação efetiva utilizada, conforme ela tenha um caroço repulsivo (força do tipo Hasegawa-Nagata modificada) ou não (força de Volkov nº 2).

Por outro lado Kanada, Kaneko e Tang [KSK 86] argumentaram que o efeito de distorção é crucial para descrever o espalhamento e a estrutura de agregados de ^7Li e ^7Be na região de baixa energia e que a dependência com a força efetiva utilizada é fraca desde que ela reproduza razoavelmente a energia de ligação dos fragmentos. Embora concordem com a importância da condição de estabilidade imposta aos fragmentos [WKT 84] não consideram relevante que o núcleo α satisfaça simultaneamente com $^3\text{He}(^3\text{H})$ essa condição.

O que observamos estudando o sistema $^3\text{He}-\alpha$ com o potencial de Skyrme é que a imposição das condições de estabilidade para ^3He e α melhora substancialmente a descrição das ressonâncias da onda parcial F. As ondas parciais com $\ell \leq 2$ têm defasagens que decrescem depressa demais com a energia, o que pode ser atribuído à dependência inadequada da interação de Skyrme com os momentos

relativos, como já foi comentado no item c., o que sugere um possível efeito do potencial. No entanto, resultados mais conclusivos acerca do efeito de distorção do ${}^3\text{He}({}^3\text{H})$ no sistema de sete partículas, poderão ser obtidos através de um estudo comparativo, utilizando os potenciais SAH e S III (ou S IV).

A P E N D I C E S

APÊNDICE A

Cálculo do núcleo de energia $\langle \mathcal{E} | \sum_{i=1}^A \hat{t}_i + V_{SK} | \mathcal{E}' \rangle$ onde

\hat{t}_i = energia cinética de um nucleon

$$V_{SK} = \sum_{i < j} V_{ij} + \sum_{i < j < k} V_{ijk}$$

$$V_{ij} = \frac{1}{2} \hat{t}_0 (1 + \alpha_0 \rho \sigma) \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) + \frac{1}{2} \hat{t}_1 [\delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \mathbf{l}_k^2 + \mathbf{l}_k^2 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)] +$$

$$+ \hat{t}_2 \mathbf{l}_k! \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \mathbf{l}_k + i \omega_0 (\mathbf{v}_i + \mathbf{v}_j) \cdot \mathbf{l}_k \times \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \mathbf{l}_k$$

$$V_{ijk} = \hat{t}_3 \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \delta(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k)$$

A força de tres corpos para núclos par-par é equivalente à força de dois corpos dependente da densidade [VB 73]

$$V_{ij} = \frac{1}{6} \hat{t}_3 (1 + \rho \sigma) \delta(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rho\left(\frac{\mathbf{r}_i + \mathbf{r}_j}{2}\right)$$

A função de onda do sistema de sete nucleons é descrita por um determinante de Slater $\phi_{\mathcal{L}}$, equação (V.1) com as funções de onda dos nucleons definidas pelas equações (V.2) e (V.3) e a densidade de partícula independente é dada pela equação:

$$\rho_q(\mathbf{r}\sigma\mathcal{L}, \mathbf{r}'\sigma'\mathcal{L}') = \sum_{\alpha\mu} (N_q^{-1})_{\mu\alpha} \varphi_{\alpha q}^*(\mathbf{r}, \sigma, \mathcal{L}) \varphi_{\mu q}(\mathbf{r}, \sigma', \mathcal{L}')$$

A soma se estende sobre todos os orbitais ocupados e $\sigma = \pm 1/2$ e $q = \pm 1/2$ são as coordenadas de spin e isospin e

$$(N_q)_{\mu\alpha} = \int \varphi_{\alpha q}^*(\mathbf{r}, \sigma, \mathcal{L}) \varphi_{\mu q}(\mathbf{r}, \sigma', \mathcal{L}') d\mathbf{r}$$

A matriz densidade completa pode ser escrita em termos de uma densidade escalar $\rho(\mathbf{r}\mathcal{L}, \mathbf{r}'\mathcal{L}')$ e uma densidade vetorial $S(\mathbf{r}\mathcal{L}, \mathbf{r}'\mathcal{L}')$ ambos hermitianos:

$$\rho(\mathbf{r}\sigma\mathcal{L}, \mathbf{r}'\sigma'\mathcal{L}') = \frac{1}{2} \left[\rho(\mathbf{r}\mathcal{L}, \mathbf{r}'\mathcal{L}') \delta\sigma\sigma' + \sum_v \langle \sigma | S_v | \sigma' \rangle S_v(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \right]$$

onde

$$\rho(r\alpha, r'\alpha') = \sum_{\sigma} \rho(r\sigma\alpha, r'\sigma'\alpha')$$

$$S(r\alpha, r'\alpha') = \sum_{\sigma\sigma'} \rho(r\sigma\alpha, r'\sigma'\alpha') \langle \sigma' | \sigma \rangle$$

O núcleo de energia $\langle \alpha | H | \alpha' \rangle$ para a interação de Skyrme pode ser escrito em termos das densidades como:

$$\langle \alpha | H | \alpha' \rangle = \langle \alpha | \alpha' \rangle \int d\mathbf{r} H(r, \alpha, \alpha')$$

onde $H(r, \alpha, \alpha')$ é da forma [EBG 75, Pa 76]

$$\begin{aligned} H(r, \alpha, \alpha') = & \frac{\hbar^2}{2m} \nabla + \frac{1}{2} t_0 \left[\left(1 + \frac{1}{2} x_0 \right) \rho^2 - \left(x_0 + \frac{1}{2} \right) \sum_q \rho_q^2 + \right. \\ & \left. \frac{1}{2} x_0 S^2 - \frac{1}{2} \sum_q S_q^2 \right] + \frac{1}{4} (t_1 + t_2) (\rho \nabla - \mathbf{y}^2) + \frac{1}{16} (t_2 - 3t_1) \rho \nabla^2 \rho \\ & + \frac{1}{32} (t_2 + 3t_1) \sum_q (\rho_q \nabla^2 \rho_q + S_q \nabla^2 S_q) + \\ & \frac{1}{8} (t_2 - t_1) \sum_q (\rho_q \nabla_q - y_q^2 + S_q \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{T}}_q - \overleftrightarrow{\mathbf{J}}_q^2) - \\ & \frac{1}{2} w_0 \sum_{qq'} (1 + \delta_{qq'}) (S_q \cdot \nabla \times y_{q'}, + \rho_q \overleftrightarrow{\nabla} \cdot \overleftrightarrow{\mathbf{J}}) + V_3(r, \alpha, \alpha') \end{aligned}$$

Para o termo t_3 , escrito como equação (V.5a)

$$V_3(r, \alpha, \alpha') = \frac{1}{4} t_3 (\rho \rho_m \rho_p - S_m^2 \rho_p - S_p^2 \rho_m)$$

e para t_3 da equação (V.5b)

$$V_3(r, \alpha, \alpha') = \frac{1}{24} t_3 \rho (6 \rho_p \rho_m + S^2 - \sum_q S_q^2)$$

As densidades que aparecem na equação acima são definidas pelas seguintes equações:

i) densidade de partícula

$$\rho_g(r, \ell, \ell') = \rho_g(r\ell, r\ell')$$

ii) densidade de energia cinética

$$T(r, \ell, \ell') = [\nabla \cdot \nabla' \rho(r\ell, r'\ell')]_{r=r'}$$

iii) densidade de spin

$$S(r, \ell, \ell') = S(r\ell, r\ell')$$

iv) densidade de momento

$$j(r, \ell, \ell') = \frac{1}{2i} [(\nabla - \nabla') \rho(r\ell, r'\ell')]_{r=r'}$$

v) tensor corrente de spin

$$J_{\mu\nu}(r, \ell, \ell') = \frac{1}{2i} [(\nabla_\mu - \nabla'_\mu) S_\nu(r\ell, r'\ell')]_{r=r'}$$

vi) densidade de energia cinética (parte vetorial)

$$T'(r, \ell, \ell') = [\nabla \cdot \nabla' S(r\ell, r\ell')]_{r=r'}$$

Para o sistema de sete partículas considerado nesse trabalho, o núcleo de energia $\langle \ell | H | \ell' \rangle$ é da forma:

$$\langle \ell | H | \ell' \rangle = T(\ell, \ell') + V_0(\ell, \ell') + V_1(\ell, \ell') + V_2(\ell, \ell') + V_3(\ell, \ell') + V_{LS}(\ell, \ell')$$

onde

$$\begin{aligned} T(\ell, \ell') &= \frac{\hbar^2}{2mb^4} \left\{ \left[\frac{21}{2} b^2 - \frac{3}{7} (\ell - \ell') \right] \langle \ell | \ell' \rangle + \right. \\ &\quad \left. + \frac{3}{2} \ell \cdot \ell' A_1 A_2 \left[\exp\left(\frac{5}{14b^2} \ell \cdot \ell'\right) + \exp\left(-\frac{9}{14b^2} \ell \cdot \ell'\right) - 2 \exp\left(-\frac{1}{7b^2} \ell \cdot \ell'\right) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_0(\mathbf{d}, \mathbf{d}') &= \frac{\frac{1}{2} k_0}{(2\pi b^2)^{3/2}} \left\{ 3 B_1 B_2 \exp\left(\frac{17}{28b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - \right. \\
 &\quad - 2 A_1 B_1 \left[\exp\left(\frac{5}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - \exp\left(-\frac{1}{7b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right] \\
 &\quad - 2 A_2 B_1 \left[\exp\left(\frac{5}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - \exp\left(-\frac{9}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right] \\
 &\quad + B_1 B_2 \left[\exp\left(-\frac{11}{28b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 4 \exp\left(\frac{45}{4b^2 49} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right] \\
 &\quad \left. - [B_1 A_2 + B_2 A_1] \left[3 \exp\left(\frac{5}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) + \exp\left(-\frac{9}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 4 \exp\left(-\frac{1}{7b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_1(\mathbf{d}, \mathbf{d}') &= \frac{\frac{1}{2} k_1}{(2\pi)^{3/2} b^7} \left\{ \right. \\
 &\quad + B_1 B_2 \exp\left(\frac{17}{28b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[\frac{27}{2} b^2 - \frac{201}{196} (\mathbf{d}^2 + \mathbf{d}'^2) - \frac{39}{196} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \\
 &\quad + B_1 B_2 \exp\left(\frac{45}{4b^2 49} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[-\frac{15}{3} b^2 + \frac{7723}{12544} (\mathbf{d}^2 + \mathbf{d}'^2) - \frac{2665}{3136} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \\
 &\quad + B_1 B_2 \exp\left(-\frac{11}{28b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[-6 b^2 + \frac{5141}{12544} (\mathbf{d}^2 + \mathbf{d}'^2) + \frac{3289}{3136} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \\
 &\quad + B_1 A_2 \exp\left(\frac{5}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[-\frac{93}{4} b^2 + \frac{527}{784} \mathbf{d}'^2 + \frac{10985}{6272} \mathbf{d}^2 - \frac{8}{49} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \\
 &\quad + B_1 A_2 \exp\left(-\frac{1}{7b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[+27b^2 - \frac{359}{448} \mathbf{d}'^2 - \frac{3705}{1792} \mathbf{d}^2 + \frac{647}{3136} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \\
 &\quad + B_1 A_2 \exp\left(-\frac{9}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[-\frac{15}{4} b^2 + \frac{405}{3136} \mathbf{d}'^2 + \frac{3965}{12544} \mathbf{d}^2 - \frac{135}{3136} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \\
 &\quad \left. + B_2 A_1 \exp\left(+\frac{5}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \left[-\frac{93}{4} b^2 + \frac{10985}{6272} \mathbf{d}'^2 + \frac{1054}{1568} \mathbf{d}^2 - \frac{8}{49} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}' \right] \right\}
 \end{aligned}$$

$$B_2 A_1 \quad p \left(-\frac{1}{7b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[+ 27b^2 - \frac{3705}{1792} \mathcal{L}'^2 - \frac{359}{448} \mathcal{L}^2 + \frac{647}{3136} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right] \\ - \frac{9}{14b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \left[- \frac{15}{2} b^2 + \frac{3965}{12544} \mathcal{L}'^2 + \frac{405}{3136} \mathcal{L}^2 - \frac{135}{3136} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$V_2(\mathcal{L}, \mathcal{L}') = \frac{k_2}{(2\pi)^{3/2} b^7} \left\{ \right.$$

$$+ B_1 B_2 \exp \left(+ \frac{17}{28b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[+ \frac{69}{392} (\mathcal{L}^2 + \mathcal{L}'^2) + \frac{333}{196} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_1 B_2 \exp \left(+ \frac{45}{196b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[+ \frac{69}{12544} (\mathcal{L}^2 + \mathcal{L}'^2) - \frac{18943}{3136} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_1 B_2 \exp \left(- \frac{11}{28b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[- \frac{2277}{12544} (\mathcal{L}^2 + \mathcal{L}'^2) + \frac{8287}{3136} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_1 A_2 \exp \left(\frac{5}{14b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[+ \frac{85}{784} \mathcal{L}'^2 - \frac{2253}{6272} \mathcal{L}^2 + \frac{1}{14} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_1 A_2 \exp \left(- \frac{1}{7b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[- \frac{151}{3136} \mathcal{L}'^2 + \frac{4527}{12544} \mathcal{L}^2 - \frac{41}{448} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_1 A_2 \exp \left(- \frac{9}{14b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[- \frac{27}{448} \mathcal{L}'^2 - \frac{3}{1792} \mathcal{L}^2 + \frac{9}{448} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_2 A_1 \exp \left(+ \frac{5}{14b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[\frac{85}{784} \mathcal{L}^2 - \frac{2253}{6272} \mathcal{L}'^2 + \frac{1}{14} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_2 A_1 \exp \left(- \frac{1}{7b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[- \frac{151}{3136} \mathcal{L}^2 + \frac{4527}{12544} \mathcal{L}'^2 - \frac{41}{448} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$+ B_2 A_1 \exp \left(- \frac{9}{14b^2} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right) \left[- \frac{27}{448} \mathcal{L}^2 - \frac{3}{1792} \mathcal{L}'^2 + \frac{9}{448} \mathcal{L}, \mathcal{L}' \right]$$

$$A_1 = \exp\left(-\frac{3}{7b^2} \mathbf{d}^2\right) \quad A_2 = \exp\left(-\frac{3}{7b^2} \mathbf{d}'^2\right)$$

$$B_1 = \exp\left(-\frac{31}{56b^2} \mathbf{d}^2\right) \quad B_2 = \exp\left(-\frac{31}{56b^2} \mathbf{d}'^2\right)$$

$$C_1 = \exp\left(-\frac{25}{42b^2} \mathbf{d}^2\right) \quad C_2 = \exp\left(-\frac{25}{42b^2} \mathbf{d}'^2\right)$$

Para o termo t_3 da equação (V.5b):

$$\begin{aligned} V_3(\mathbf{d}, \mathbf{d}') &= \frac{t_3}{2(\pi b^2 \sqrt{3})^3} \times \left\{ \right. \\ &+ C_1 C_2 \left[30 \exp\left(\frac{1}{42b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 7 \exp\left(-\frac{10}{21b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 52 \exp\left(\frac{4}{21b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) + 4 \exp\left(-\frac{13}{42b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right] \\ &+ (C_1 A_2 + C_2 A_1) \left[+ 12 \exp\left(-\frac{1}{7b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 15 \exp\left(\frac{5}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) + \right. \\ &\quad \exp\left(-\frac{9}{14b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) + 10 \exp\left(-\frac{1}{49b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 4 \exp\left(-\frac{9}{42b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \\ &\quad \left. \left. - 6 \exp\left(\frac{41}{98b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) + 6 \exp\left(-\frac{1}{7b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right] \right\} \end{aligned}$$

$$V_{LS}(\mathbf{d}, \mathbf{d}') = \frac{i W_0 (\mathbf{d} \times \mathbf{d}') \cdot \mathbf{T}}{2 b^7 (2\pi)^{3/2}} B_1 B_2 \left\{ 3 \exp\left(+\frac{17}{28b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) + \right. \\ \left. 3 \exp\left(-\frac{11}{28b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) - 6 \exp\left(\frac{45}{196b^2} \mathbf{d} \cdot \mathbf{d}'\right) \right\}$$

APÊNDICE B

O núcleo de energia potencial nuclear $V(\mathbb{b}, \mathbb{b}')$, sem os termos intrínsecos, para o sistema ${}^3\text{He}-\alpha$ é da forma

$$V(\mathbb{b}, \mathbb{b}') = V_0(\mathbb{b}, \mathbb{b}') + \sum_{i=1}^3 V_i(\mathbb{b}, \mathbb{b}') + V_{Ls}(\mathbb{b}, \mathbb{b}')$$

As expressões analíticas de $V(\mathbb{b}, \mathbb{b}')$ foram calculadas com o programa algébrico REDUCE, a partir das equações correspondentes do APENDICE A.

$$V_0(\mathbb{b}, \mathbb{b}') = \frac{t_0}{\pi^3} \sum_{j=1}^5 a_j \exp(E_j) [\exp U_j + \exp U_j (\mathbb{b} \leftrightarrow \mathbb{b}')$$

$$a_1 = \frac{9}{16}$$

$$a_2 = -\frac{3}{2} \left(\frac{1}{5} \right)^{3/2}$$

$$a_3 = -6 \left(\frac{1029}{5633} \right)^{3/2}$$

$$a_4 = -9 \left(\frac{6}{23} \right)^{3/2}$$

$$a_5 = 6 \left(\frac{3}{13} \right)^{3/2}$$

$$a_6 = 3 \left(\frac{2}{5} \right)^{3/2}$$

$$E_1 = \frac{17}{24} b^2 \mathbb{b}, \mathbb{b}'$$

$$E_2 = -\frac{11}{30} b^2 \mathbb{b}, \mathbb{b}'$$

$$E_3 = \frac{2205}{11266} b^2 \mathbb{b}, \mathbb{b}'$$

$$E_4 = \frac{10}{23} b^2 \mathbb{b}, \mathbb{b}'$$

$$E_5 = -\frac{2}{13} b^2 \mathbb{b}, \mathbb{b}'$$

$$E_6 = -\frac{6}{5} b^2 \mathbb{b}, \mathbb{b}'$$

O símbolo $U_j(\mathbb{b} \leftrightarrow \mathbb{b}')$ significa que essa expressão é obtida trocando \mathbb{b} por \mathbb{b}' da função U_j anteriormente definida.

$$\begin{aligned}
 U_1 &= -\frac{17}{48} b^2 (\|b\|^2 + \|b'\|^2) & U_4 &= -\frac{211 b^2 \|b\|^2 - 127 b^2 \|b'\|^2}{552} \\
 U_2 &= -\frac{9}{40} b^2 (\|b\|^2 + \|b'\|^2) & U_5 &= -\frac{95 b^2 \|b\|^2 - 53 b^2 \|b'\|^2}{312} \\
 U_3 &= -\frac{24367}{24 \times 5633} b^2 (\|b\|^2 + \|b'\|^2) & U_6 &= -\frac{183 b^2 \|b\|^2 - 267 b^2 \|b'\|^2}{360}
 \end{aligned}$$

$$V_i(\|b\|, \|b'\|) = t_i \left(\frac{3}{14\pi^2} \right)^{3/2} \sum_{j=1}^9 (G_{ij} + H_{ij}) \exp(D_j + F_j)$$

onde $i = 1, 2$

$$G_{11} = \frac{6,4639}{b^2} + 3,0339 (\|b\|^2 + \|b'\|^2)$$

$$G_{12} = -\frac{3,5517}{b^2} - 0,3267 (\|b\|^2 + \|b'\|^2)$$

$$G_{13} = -\frac{4,1592}{b^2} - 0,0860 (\|b\|^2 + \|b'\|^2)$$

$$G_{14} = -\frac{20,5003}{b^2} - 2,6328 \|b\|^2 - 1,9564 \|b'\|^2$$

$$G_{15} = +\frac{20,4661}{b^2} + 2,0227 \|b\|^2 + 1,3701 \|b'\|^2$$

$$G_{16} = -\frac{3,2570}{b^2} - 2,7488 \|b\|^2 - 2,8398 \|b'\|^2$$

$$G_{17} = G_{14} (\|b\| \leftrightarrow \|b'\|)$$

$$G_{18} = G_{15} (\|b\| \leftrightarrow \|b'\|)$$

$$G_{19} = G_{16} (\|b\| \leftrightarrow \|b'\|)$$

$$G_{21} = \frac{10,8181}{b^2} - 4,3990 (\mathbb{b}^2 + \mathbb{b}'^2)$$

$$G_{22} = -\frac{2,7671}{b^2} + 0,8742 (\mathbb{b}^2 + \mathbb{b}'^2)$$

$$G_{23} = -\frac{3,6358}{b^2} + 1,0996 (\mathbb{b}^2 + \mathbb{b}'^2)$$

$$G_{24} = -\frac{0,7965}{b^2} + 0,4543 \mathbb{b}^2 - 0,2296 \mathbb{b}'^2$$

$$G_{25} = \frac{0,9716}{b^2} - 0,3569 \mathbb{b}^2 + 0,0482 \mathbb{b}'^2$$

$$G_{26} = -\frac{1,1579}{b^2} + 0,3306 \mathbb{b}^2 + 0,7837 \mathbb{b}'^2$$

$$G_{27} = G_{24} (\mathbb{b} \leftrightarrow \mathbb{b}')$$

$$G_{28} = G_{25} (\mathbb{b} \leftrightarrow \mathbb{b}')$$

$$G_{29} = G_{26} (\mathbb{b} \leftrightarrow \mathbb{b}')$$

$$H_{11} = -5,2736 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}'$$

$$H_{12} = -0,2634 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}'$$

$$H_{13} = +0,5768 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}'$$

$$H_{14} = 2,8430 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}' = H_{17}$$

$$H_{15} = 1,2440 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}' = H_{18}$$

$$H_{16} = -5,2503 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}' = H_{19}$$

$$H_{21} = 10,1041 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}'$$

$$H_{22} = -4,4141 \mathbb{b} \cdot \mathbb{b}'$$

$$H_{23} = 3,1126 \text{ lb. lb}'$$

$$H_{24} = -0,1141 \text{ lb. lb}' = H_{27}$$

$$H_{25} = -0,2098 \text{ lb. lb}' = H_{28}$$

$$H_{26} = 1,0220 \text{ lb. lb}' = H_{29}$$

$$D_1 = -0,3542 b^2 (l_b^2 + l_b'^2)$$

$$D_2 = -0,1802 b^2 (l_b^2 + l_b'^2)$$

$$D_3 = -0,2250 b^2 (l_b^2 + l_b'^2)$$

$$D_4 = -0,2301 b^2 l_b^2 - 0,3822 b^2 l_b'^2$$

$$D_5 = -0,1699 b^2 l_b^2 - 0,3045 b^2 l_b'^2$$

$$D_6 = -0,5083 b^2 l_b^2 - 0,7417 b^2 l_b'^2$$

$$D_7 = D_4 (l_b \leftrightarrow l_b')$$

$$D_8 = D_5 (l_b \leftrightarrow l_b')$$

$$D_9 = D_6 (l_b \leftrightarrow l_b')$$

$$F_1 = 0,7083 b^2 l_b \cdot l_b' , \quad F_4 = 0,4348 b^2 l_b \cdot l_b' = F_7$$

$$F_2 = 0,1957 b^2 l_b \cdot l_b' , \quad F_5 = -0,1538 b^2 l_b \cdot l_b' = F_8$$

$$F_3 = -0,3667 b^2 l_b \cdot l_b' , \quad F_6 = -1,2 b^2 l_b \cdot l_b' = F_9$$

$$V_3(lk, lk') = \frac{t_3}{2(7b^2\pi^3)^{3/2}} \sum_{j=1}^{12} p_j \left[\exp R_j + \exp R_j(lk \leftrightarrow lk') \right] \exp S_j$$

$$p_1 = \frac{25}{2} \left(\frac{7}{8} \right)^{3/2}$$

$$S_1 = \frac{11}{24} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_2 = 15 \left(\frac{12}{17} \right)^{3/2}$$

$$S_2 = \frac{2}{119} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_3 = -\frac{7}{2} \left(\frac{21}{25} \right)^{3/2}$$

$$S_3 = -\frac{2}{5} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_4 = -26 \left(\frac{21}{29} \right)^{3/2}$$

$$S_4 = \frac{4}{29} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_5 = 2 \left(\frac{28}{37} \right)^{3/2}$$

$$S_5 = -\frac{26}{111} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_6 = 10 \left(\frac{9604}{9511} \right)^{3/2}$$

$$S_6 = -\frac{1666}{9511} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_7 = -15 \left(\frac{2401}{2194} \right)^{3/2}$$

$$S_7 = \frac{392}{1097} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_8 = -\left(\frac{2401}{1361} \right)^{3/2}$$

$$S_8 = -\frac{1617}{1361} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_9 = 10 \left(\frac{196}{199} \right)^{3/2}$$

$$S_9 = \frac{14}{199} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_{10} = -4 \left(\frac{28}{17} \right)^{3/2}$$

$$S_{10} = -\frac{18}{17} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_{11} = -6 \left(\frac{9604}{8119} \right)^{3/2}$$

$$S_{11} = \frac{4018}{8119} b^2 lk \cdot lk'$$

$$p_{12} = 6$$

$$S_{12} = -\frac{b^2}{7} lk \cdot lk'$$

$$R_1 = -\frac{11}{48} b^2 (l_k^2 + l_k'^2)$$

$$R_2 = -\frac{367}{2856} b^2 (l_k^2 + l_k'^2)$$

$$R_3 = -\frac{5}{24} b^2 (l_k^2 + l_k'^2)$$

$$R_4 = -\frac{97}{696} b^2 (l_k^2 + l_k'^2)$$

$$R_5 = -\frac{47}{296} b^2 (l_k^2 + l_k'^2)$$

$$R_6 = -\frac{7 \times 4601}{24 \times 9511} b^2 l_k^2 - \frac{7 \times 3363}{8 \times 9511} b^2 l_k'^2$$

$$R_7 = -\frac{4669}{8 \times 1097} b^2 l_k^2 - \frac{3157}{8 \times 1097} b^2 l_k'^2$$

$$R_8 = -\frac{7 \times 2167}{24 \times 1361} b^2 l_k^2 - \frac{7 \times 3539}{24 \times 1361} b^2 l_k'^2$$

$$R_9 = -\frac{623}{24 \times 199} b^2 l_k^2 - \frac{469}{8 \times 199} b^2 l_k'^2$$

$$R_{10} = -\frac{169}{408} b^2 l_k^2 - \frac{281}{408} b^2 l_k'^2$$

$$R_{11} = -\frac{7 \times 5993}{24 \times 8119} b^2 l_k^2 - \frac{7 \times 3827}{8 \times 8119} b^2 l_k'^2$$

$$R_{12} = -\frac{23}{168} b^2 l_k^2 - \frac{17}{56} b^2 l_k'^2$$

$$V_{LS}(l_k, l_k') = i W_0 (l_k \times l_k') \cdot \nabla \sum_{j=1}^3 x_j \exp(E_j + U_j)$$

$$x_1 = 1,4110 \times 10^{-2}$$

$$x_2 = 0,4038 \times 10^{-2}$$

$$x_3 = -0,6400 \times 10^{-2}$$

A P E N D I C E C

O potencial nuclear $V_\ell(k, k')$ na onda parcial ℓ é dado por:

$$V_\ell(k, k') = V_{0\ell}(k, k') + \sum_{j=1}^3 V_{i\ell}(k, k') + V_{L\ell}(k, k')$$

onde

$$V_{0\ell}(k, k') = \frac{12 t_0}{\pi^2} \left(\frac{3}{14} \right)^{3/2} \sum_{j=1}^5 b_j i_\ell(E_j) M_j [\exp U_j + \exp U_j(k \rightarrow k')]$$

$$b_1 = \frac{1}{2} \left(\frac{7}{6} \right)^{3/2}$$

$$b_2 = \frac{1}{2} \left(\frac{14}{15} \right)^{3/2}$$

$$b_3 = -2 \left(\frac{2 \times 49 \times 49}{5633} \right)^{3/2}$$

$$b_4 = -3 \left(\frac{2 \times 49 \times 49}{5633} \right)^{3/2}$$

$$b_5 = 2 \left(\frac{14}{13} \right)^{3/2}$$

$$b_6 = \left(\frac{28}{15} \right)^{3/2}$$

$$M_j \begin{cases} = 1 & \text{para } j = 1, 3, 4 \\ = (-1)^\ell & \text{para } j = 2, 5, 6 \end{cases}$$

A função $i_\ell(x)$ é a função de Bessel esférica modificada de ordem ℓ .

$$V_{i\ell}(k, k') = t_i \left(\frac{3}{14}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{4}{\pi^2} \sum_{j=1}^9 \left\{ G_{ij} i_\ell(F_j) + H_{ij} \frac{k k'}{(2\ell+1)} \right.$$

$$\left. [(\ell+1) i_{\ell+1}(F_j) + \ell i_{\ell-1}(F_j)] \right\} M_j \exp(D_j)$$

$$M_j \begin{cases} = 1 & \text{para } j = 1, 2, 4, 7 \\ = (-1)^\ell & \text{para } j = 3, 5, 6, 8, 9 \end{cases}$$

$$V_{3\ell}(k, k') = \frac{2\pi t_3}{(7b^2\pi^3)^{3/2}} \sum_{j=1}^{12} q_j M_j i_\ell(S_j) [\exp R_j + \exp R_j(k - k')]$$

$$q_1 = 13 \left(\frac{1}{8}\right)^{3/2}$$

$$q_7 = -15 \left(\frac{49 \times 49}{2194}\right)^{3/2}$$

$$q_2 = 15 \left(\frac{12}{17}\right)^{3/2}$$

$$q_8 = - \left(\frac{49 \times 49}{1361}\right)^{3/2}$$

$$q_3 = -\frac{7}{2} \left(\frac{21}{25}\right)^{3/2}$$

$$q_9 = 10 \left(\frac{4 \times 49}{199}\right)^{3/2}$$

$$q_4 = -26 \left(\frac{21}{29}\right)^{3/2}$$

$$q_{10} = -4 \left(\frac{28}{17}\right)^{3/2}$$

$$q_5 = 2 \left(\frac{28}{37}\right)^{3/2}$$

$$q_{11} = -6 \left(\frac{4 \times 49 \times 49}{8119}\right)^{3/2}$$

$$q_6 = 10 \left(\frac{4 \times 49 \times 49}{9511}\right)^{3/2}$$

$$q_{12} = 6$$

$$M_j \begin{cases} = 1 & \text{para } j = 1, 2, 4, 7, 9, 11 \\ = (-1)^\ell & \text{para } j = 3, 5, 6, 8, 10, 12 \end{cases}$$

$$V_{ls}^{j\ell}(k_1 k_2) = 4\pi W_0 \left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \frac{k_1 k_2}{(2\ell+1)} \times$$

$$\sum_{n=1}^3 x_n \exp [U_n [(l+1) j_{l+1}(E_n) + l j_{l-1}(E_n)] M_m$$

$$M_m \begin{cases} = 1 & \text{para } n = 1, 3 \\ = (-1)^l & \text{para } n = 2 \end{cases}$$

REFERÊNCIAS

- [ABD 81] F. Arickx, J. Broeckhove, E. Deumens e P. van Leuven.
J. Comput. Phys. 39 (1981) 272.
- [AS '70] M. Abramowitz e I. Stegun, Eds. "Handbook of Mathematical Functions", Dover (N.Y.) 1970.
- [Ba 58] M. Baker. Ann. Phys. (N.Y.) 4 (1958) 271.
- [BBM 75] R. Beck, J. Borysowicz, D.M. Brink e M.V. Mihailovic.
Nucl. Phys. A 244 (1975) 45.
- [BD 79] J. Broeckhove e E. Deumens. Z. Physik A 292 (1979) 243.
- [BDR 79] G. Béart, J. Deenem e G. Reidemeister. Z. Physik A 290 (1979) 319.
- [BFG 75] M. Beiner, H. Flocard, N. Van Giai e P. Quentin. Nucl. Phys. A 238 (1975) 29.
- [BH 74] D. Baye e P.H. Heenem. Nucl. Phys. A 233 (1974) 304.
- [BMP 81] R. Beck, M.V. Mihailovic e M. Poljsak. Nucl. Phys. A 351 (1981) 295.
- [BRT 83] R.F. Barrett, B.A. Robson, W. Tobocman. Rev. of Mod. Phys. 55 (1983) 155.
- [BT 68] R.E. Brown e Y. Tang. Phys. Rev. 176 (1968) 1235.
- [CB 77] L.F. Canto e D.M. Brink. Nucl. Phys. A 279 (1977) 85.
- [EBG 75] Y.M. Engel, D.M. Brink, K. Goeke, S.J. Krieger e D. Vautherin. Nucl. Phys. A 249 (1975) 215.
- [FBP 82] R.D. Furber, R.E. Brown, G.L. Peterson, D.R. Thompson e Y.C. Tang. Phys. Rev. C 25 (1982) 23.
- [FC 77] H. Friedrich e L.F. Canto. Nucl. Phys. A 291 (1977) 249.
- [FG 49] L. Fox e E.T. Goodwin. Proc. Cambridge Phil. Soc. 45 (1949) 573..
- [FHW 74] H. Friedrich, H. Hüsker e A. Weiguny. Nucl. Phys. A 220 (1974) 125.
- [Fl 75] T. Fliessbach. Z. Physik A 272 (1975) 39.
- [Fr 74] H. Friedrich. Nucl. Phys. A 224 (1974) 537.

- [Fr 81] H. Friedrich. Phys. Rep. 74 (1981) 210.
- [FT 81] H.R. Fiebig e W. Timm. Nucl. Phys. A 268 (1981) 164.
- [FT 85] Y. Fujiwara e Y.C. Tang. Phys. Rev. C 31 (1985) 342.
- [FV 76] H. Flocard e D. Vautherin. Nucl. Phys. A 264 (1976) 197.
- [GHL 73] B. Giraud, J.C. Hocquenghem e A. Lumbroso. Phys. Rev. C 7 (1973) 2274.
- [Go 66] K. Gottfried. "Quantum Mechanics", W.A. Benjamin, Inc., New York, 1966.
- [Go 75] D. Gogny. Proc. Int. Conf. on Nuclear Selfconsistent Fields, Trieste, 1975. G. Ripka and M. Porneuf, Eds. North Holland, Amsterdam, 1975.
- [GP 81] D. Galetti e A.F.R. de Toledo Piza. Phys. Rev. C 24 (1981) 2311.
- [GT 75] B. Giraud e J. Le Tourneau. Nucl. Phys. A 240 (1975) 365.
- [GW 57] J.J. Griffin e J.A. Wheeler. Phys. Rev. 108 (1957) 311.
- [HMU 54] S. Hochberg, H.S.W. Massey e L.M. Underhill. Proc. Phys. Soc. (London) A67 (1954) 957.
- [Ho 63] P.E. Hodgson. "The Optical Model of Elastic Scattering", Clarendon Press, Oxford, 1963.
- [Ho 67] J.R. Hoyland. J. Chem. Phys. 46 (1967) 4112.
- [Ho 70] H. Horiuchi. Prog. Theor. Phys. 43 (1970) 375.
- [Ho 72] H. Horiuchi. Prog. Theor. Phys. 47 (1972) 1058.
- [HS 73] H. Horiuchi e Y. Suzuki. Prog. Theor. Phys. 49 (1973) 1974.
- [HW 53] D.L. Hill e J.A. Wheeler. Phys. Rev. 89 (1953) 119.
- [HWW 77] H. Hüskens, W. Wedekind e A. Weiguny. Nucl. Phys. A 286 (1977) 163.
- [JP 51] R. Jost e A. Pais. Phys. Rev. 82 (1951) 840.
- [KBT 74] J.A. Koepke, R.E. Brown, Y.C. Tang e D.R. Thompson. Phys. Rev. C 9 (1974) 823.
- [Kl 71] A. Klein. Proc. of 1971 Mont Tremblant Int. Summer School, Univ. of Toronto Press, eds. D.J. Rowe, L. Trainor, S. Wong and T. Donnelly.

- [KM 74] M. Kamimura e T. Matsuse. Prog. Theor. Phys. 51 (1974) 438.
- [KMA 83] T. Kajino, T. Matsuse e A. Arima. Phys. Rev. C 28 (1983) 57.
- [KMA 84] T. Kajino, T. Matsuse e A. Arima. Nucl. Phys. A 414 (1984) 185.
- [KSK 86] T. Kaneko, M. Shirata, H. Kanada e Y.C. Tang. Phys. Rev. C 34 (1986) 771.
- [La 76] L. Lathouwers. Ann. Phys. (N.Y.) 102 (1976) 347.
- [LKT 81] Q.K.K. Liu, H. Kanada and Y.C. Tang. Phys. Rev. C 23 (1981) 645.
- [LL 82] L. Lathouwers e P. van Leuven. Adv. Chem. Phys. 49 (1982) 115.
- [Lo 55] P.O. Lowdin. Phys. Rev. 97 (1955) 1474.
- [LST 81] K. Langanke, R. Stademann e W. Timm. Phys. Rev. C 24 (1981) 1023.
- [Lu 74] A. Lumbroso. Phys. Rev. C 10 (1974) 1271.
- [MKF 74] T. Matsuse, M. Kamimura e Y. Fukushima. Prog. Theor. Phys. 51 (1974) 438.
- [MP 78] M.V. Mihalilovic' e M. Poljšak. Nucl. Phys. A 311 (1978) 377.
- [NV 72] J.W. Negele e D. Vautherin. Phys. Rev. C 5 (1972) 1472.
- [Pa 76] K.H. Passler. Nucl. Phys. A 257 (1976) 253.
- [PC 81] E.J.V. de Passos e F.F. de Souza Cruz. Phys. Rev. C 24 (1981) 690.
- [PP 78] A.F.R. de Toledo Piza e E.J.V. de Passos. Il Nuovo Cimento 45B (1978) 1.
- [PP 80] E.J.V. de Passos e A.F.R. de Toledo Piza. Phys. Rev. C 21 (1980) 425.
- [PPG 77] A.F.R. de Toledo Piza, E.J.V. de Passos, D. Galetti, M. C. Nemes e M.M. Watanabe. Phys. Rev. C 15 (1977) 1477.
- [Ra 75] R.C. Raffeneti. Int. J. Quantum Chem. Symp. 9 (1975) 289.

- [Ro 56] H.H. Robertson. Proc. Cambridge Phil. Soc. 52 (1956) 538.
- [RS 70] W.P. Reinhardt e A. Szabo. Phys. Rev. A 1 (1970) 1162.
- [RS 72] M. Reed e B. Simon. "Methods of Modern Mathematical Analysis", Vol. I, Academic Press, 1972.
- [RS 80] Peter Ring e Peter Schuck. "The nuclear many body problem", Springer Verlag New York Inc (1980).
- [RT 70] I. Reichstein e Y.C. Tang. Nucl. Phys. A 158 (1970) 529.
- [Sa 69] S. Saito. Prog. Theor. Phys. 41 (1969) 705.
- [Sc 54] J.S. Schwinger. Phys. Rev. 93 (1954) 615.
- [Sk 56] T.H.R. Skyrme. Phil. Mag. 1 (1956) 1043.
- [Sk 59] T.H.R. Skyrme. Nucl. Phys. 9 (1959) 615.
- [SKI 80] A. Tohsaki-Suzuki, M. Kamimura and K. Ikeda. Prog. Theor. Phys. Suppl. 68 (1980) 359.
- [ST 67] R.J. Spiger e T.A. Tombrello. Phys. Rev. C 163 (1967) 964.
- [Su 76] W. Sünkel. Phys. Lett. 65 B (1976) 419.
- [SW 72] W. Sünkel e K. Wildermuth. Phys. Lett. 41 B (1972) 439.
- [Ta 72] N. de Takacsy. Phys. Rev. C 5 (1972) 1883.
- [TLT 78] Y.C. Tang, M. Le Mere e D.R. Thompson. Phys. Rep. 47 (1978) 167.
- [TP 83] J.G. Ribeiro Tostes e A.F.R. de Toledo Piza. Phys. Rev. A 28 (1983) 538.
- [TS 77] A.J. Thakkar e V. Smith. Phys. Rev. A 15 (1977) 1.
- [TS 78] A. Tohsaki-Suzuki. Prog. Theor. Phys. 59 (1978) 1861.
- [TSW 63] Y.C. Tang, E. Schmid e K. Wildermuth. Phys. Rev. 131 (1963) 2631.
- [TTT 73] F. Tanabe, A. Tohsaki e R. Tamagaki. Prog. Theor. Phys. 50 (1973) 1774.
- [Va 73] D. Vautherin. Phys. Rev. C 7 (1973) 296.
- [VB 73] D. Vautherin e D.M. Brink. Phys. Rev. C 5 (1973) 626.

- [Vo 65] A.B. Volkov. Nucl. Phys. 74 (1965) 33.
- [We 27] H. Weyl. Zeits. Phys. 46 (1927) 1.
- [Wh 37] J.A. Wheeler. Phys. Rev. 52 (1937) 1107.
- [WKT 84] H. Walliser, H. Kanada e Y.C. Tang. Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 399.
- [WLK 83] H. Walliser, Q.K.K. Liu, H. Kanada e Y.C. Tang. Phys. Rev. C 28 (1983) 57.
- [Wo 70] C.W. Wong. Nucl. Phys. A 147 (1970) 545.
- [Wo 75] C.W. Wong. Phys. Rep. 15 (1975) 283.
- [Ya 54] Y. Yamaguchi. Phys. Rev. 95 (1954) 1628.
- [Za 71] D.A. Zaikine. Nucl. Phys. A 170 (1971) 584.

E R R A T A

Página 35 , Equação (IV.20)

$$g(\mathbf{k}) = \sqrt{\Lambda(\mathbf{k})} \int u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{k}) f(\mathbf{k}) d\mathbf{k}$$

Página 47 , segundo parágrafo:

..... Hartree - Fock [VB 72, Va 73 ,BFG 75]

Página 93

[HW 53] D.L.Hill e J.A.Wheeler, Phys. Rev 89 (1953) 1102

Página 94 , omitir a referência [KMA 83]

Página 95

[TS 78] A.Tohsaki-Suzuki, Prog.Theor.Phys. 59 (1978) 1261

[VB 72] D.Vautherin e D.M.Brink , Phys.Rev.C5(1972)626

Página 34 , Equação (IV.10)

$$\int [H(\mathbf{k}, \mathbf{k}') - E_k N(\mathbf{k}, \mathbf{k}')] f(\mathbf{k}') d\mathbf{k}' = 0$$

Equação (IV.12)

$$N(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \langle \mathbf{k} | \mathbf{k}' \rangle$$