

Alto
Caio Henrique Lewenkopf

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA



O ACOPLAMENTO DE UMA QUASI-PARTÍCULA
A UM CAROÇO DE BOHR

Caio Henrique Lewenkopf

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA
AO INSTITUTO DE FÍSICA DA UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO



SÃO PAULO
1988

Universidade de São Paulo
Instituto de Física

O ACOPLAMENTO DE UMA QUASI-PARTÍCULA A UM CAROÇO DE BOHR

Caio Henrique Lewenkopf

Orientador : Prof. Dr. Iuda Dawid Goldman vel Lejbman



Defesa em 18/5/88

Dissertação de Mestrado

São Paulo 1988

539.74

L671a

M

21

FICHA CATALOGRÁFICA

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

Lewenkopf, Caio Henrique

O acoplamento de uma quasi-partícula a um caroço
de Bohr. São Paulo, 1988.

Dissertação (Mestrado) - Universidade de São Pau-
lo. Instituto de Física. Departamento de Física Expe-
rimental.

Área de Concentração: Física Nuclear

Orientador: Prof. Dr. Iuda Dawid Goldman Vel-
Lejbman

Unitermos: 1.Estrutura nuclear; 2.Níveis de exci-
tação; 3.Transições eletromagnéticas; 4.Hamiltoniano
de Bohr; 5.Núcleos transicionais.

USP/IF/SBI - 20/88

Agradecimentos

várias pessoas colaboraram para a realização deste trabalho, tanto direta como indiretamente, quer no plano científico como no plano emocional, a todas serei sempre grato. Esta tese, no entanto, não seria possível sem a colaboração do Prof. Dr. M. T. F. da Cruz. Obrigado Tiago.

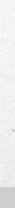
O RESUMO

Através de um modelo que acopla uma quasi-partícula a um caroço de Bohr, resolvido pelo método de Kumar e Baranger, núcleos ímpares são estudados.

São calculadas energias de excitação e velocidades de transição para os isótopos ^{133}Xe , ^{183}W , ^{99}Tc e ^{101}Rh .

São discutidas as limitações do modelo.

a meus pais,
pelo seu amor e carinho



Agradecimentos

várias pessoas colaboraram para a realização deste trabalho, tanto direta como indiretamente, quer no plano científico como no plano emocional, a todas serei sempre grato. Esta tese, no entanto, não seria possível sem a colaboração do Prof. Dr. M. T. F. da Cruz. Obrigado Tiago.

O RESUMO

Através de um modelo que acopla uma quasi-partícula a um caroço de Bohr, resolvido pelo método de Kumar e Baranger, núcleos ímpares são estudados.

São calculadas energias de excitação e velocidades de transição para os isótopos ^{133}Xe , ^{183}W , ^{97}Tc e ^{101}Rh .

São discutidas as limitações do modelo.

ABSTRACT

Odd nuclei are studied coupling one quasi-particle to a Bohr's core, solved by Kumar Baranger's method.

Calculations are performed for energies and transition rates for the following isotopes : ^{133}Xe , ^{183}W , ^{99}Tc and ^{101}Rh .

Limitations of the model are discussed.

23
24
24
25
27
27
28
31
32
34
34
35
35
36
36
37
37
37
37

O Acoplamento de uma Quasi-Partícula a um Carço de Bohr

Índice

I.	Introdução	2
II.	O Modelo	5
	1. O Hamiltoniano	6
	2. O Estado Fundamental	9
	3. O Carço	13
	i. O ATDHB	13
	ii. O Hamiltoniano Coletivo	17
	4. O Acoplamento	18
	5. As Bases	20
	6. A Diagonalização	24
	i. A Diagonalização Direta	24
	ii. A Diagonalização com Projecção	26
	7. Os Observáveis	27
	i. Elementos de Matriz de Quadrupolo Elétrico	27
	ii. Elementos de Matriz de Dipolo Magnético .	29
III.	Os Cálculos	31
	1. O Procedimento	32
	2. Os Resultados	34
	i. O ^{133}Xe	34
	ii. O ^{183}W	37
	iii. O ^{99}Tc e o ^{101}Rh	39
IV.	Conclusões	46
	Apêndices	48
	A. Convenções	48
	B. Função de Onda Microscópica	49
	C. Operador Macroscópico x Microscópico ...	51
	Referências	53



I. INTRODUÇÃO

Frustra fit per plura
quod potest fieri per pauciora.
(William de Ockham)

A evolução da física está profundamente associada às grandes sínteses. Quando nos recordamos de grandes avanços científicos do passado logo nos vêm à lembrança fórmulas simples ou mesmo conceitos expressos de forma sintética. Quando vemos a física nuclear contemporânea poucas esperanças temos de que possamos recuperar este histórico poder de síntese.

A interação nucleon-nucleon até hoje não é completamente entendida, e mesmo que fosse sabemos resolver analiticamente apenas sistemas quânticos de até três corpos. Diante deste quadro, como abordar metodologicamente o estudo de um sistema nuclear de muitos corpos?

A resposta deve ser procurada na fenomenologia na esperança de que esta nos forneça indicações de que podemos reduzir o número de graus de liberdade do problema sem introduzir uma simplificação demasiada no método.

Observando os níveis de excitação dos isótopos par-par da tabela periódica podemos notar que a razão entre suas energias não é aleatória. É possível separar um grupo cujo espectro é em boa aproximação o de um rotor rígido axialmente deformado e ainda um outro bem descrito por um oscilador harmônico pentadimensional. É claro que boa parte dos núclídeos não pertence a nenhum dos dois grupos, mesmo relaxando o grau de exigência na descrição dos espectros. Estes comportamentos, no entanto, são indicações de movimentos nucleares coletivos e estes dois conjuntos devem ser casos limites em uma teoria fenomenológica.

Esta é a essência da grande síntese, ponto de partida deste trabalho: o Hamiltoniano de Bohr⁽¹⁾. Em seu trabalho Bohr considerou uma Hamiltoniana mecanicista com um termo de rotação, um de vibração e uma energia potencial e a quantizou. A solução analítica deste Hamiltoniano só foi



obtida para alguns limites^(2,3). Métodos numéricos para tratar o modelo em computadores eletrônicos tiveram muito sucesso em explicar as propriedades dos níveis de baixa energia ao longo de tabela periódica⁽⁴⁻⁸⁾.

Observando os níveis de excitação dos isótopos ímpares vizinhos aos componentes dos conjuntos que constituem limites do Hamiltoniano de Bohr, também notamos um padrão. Vizinho a um núcleo rotacional par-par, o núcleo ímpar apresenta, em geral, uma estrutura rotacional simples. Embora um núcleo ímpar vizinho a um núcleo par-par vibracional tenha um espectro mais difícil de ser caracterizado, podemos observar em alguns núcleos ímpares vários níveis quase degenerados próximos a estados excitados do núcleo par vizinho correspondente.

A metodologia inicialmente proposta para o estudo destes núclídeos foi supor que a partícula extra pouca influência possui sobre o movimento coletivo. Esta hipótese é também a hipótese central de nosso estudo.

Surgiram, então, tratamentos que acoplavam a partícula extra aos casos solúveis analiticamente do Hamiltoniano de Bohr^(1,10,11).

Os núcleos ímpares passaram a ser tratados em dois limites: o limite do acoplamento forte, em que a partícula desemparelhada move-se segundo o movimento do caroço e o acoplamento fraco em que a partícula desemparelhada mantém sua órbita esférica sendo apenas perturbada pelo movimento do caroço. Estes dois quadros fornecem boas explicações para núcleos com deformação pronunciada (rotacionais) e para núcleos quase esféricos (vibracionais) respectivamente. Mais recentemente^(12,13) o limite de desacoplamento, em que a força de Coriolis e centrífuga predominam, foi capaz de descrever alguns núcleos ímpares transicionais.

Todos estes tratamentos, no entanto, partem de um Hamiltoniano coletivo restrito. Para núcleos rotacionais ou mesmo vibracionais esta é uma escolha natural, mas para núcleos transicionais esta escolha arbitrária é complicada pela própria dificuldade de explicarmos o núcleo par vizinho. Este problema nos remete novamente aos núcleos pares. A primeira abordagem para o entendimento dos núcleos pares transicionais foi a introdução de anarmonicidades nas

vibrações quadrupolares⁽⁹⁾ partindo do caso vibracional e de assimetria na deformação ($\gamma \neq 0$)⁽¹⁴⁾ partindo do caso rotacional. Com o surgimento de métodos numéricos para a solução completa do Hamiltoniano de Bohr, observou-se⁽¹⁵⁾ que uma energia potencial coletiva com um mínimo axial pode levar a um espectro vibracional com anarmonicidades dependendo dos parâmetros de inércia. Isto nos revela que descrições simplificadas podem até reproduzir o espectro de excitação, mas suas funções de onda certamente não serão satisfatórias.

A proposta metodológica adotada neste trabalho para núcleos ímpares é então⁽¹⁶⁾: acoplar uma quasi-partícula a um Hamiltoniano coletivo cujos parâmetros de inércia e energia potencial foram derivados microscopicamente.

II. O MODELO

Caro amigo, a teoria é cinza
verde é a iluminada árvore da vida.
(J.W. von Goethe)

Este modelo propõe o estudo de um sistema de um número ímpar de nucleons a partir de um Hamiltoniano microscópico com um termo de campo médio mais uma interação residual de dois corpos.

O estudo está restrito à interação esquemática do tipo emparelhamento mais quadrupolo-quadrupolo. Esta interação residual além do forte apelo físico (secção II.1), é facilmente tratável nos levando a resultados, para a energia do estado fundamental, já anteriormente preditos por teorias fenomenológicas⁽¹⁷⁾.

O tratamento microscópico para estados excitados é, no entanto, bastante mais complexo. Esta dificuldade nos leva à necessidade de uma redução dos graus de liberdade do sistema. Isto será feito obtendo um Hamiltoniano coletivo a partir da teoria adiabática de Hartree Bogolyubov dependente do tempo (secção II.3) para um número par de partículas.

O tratamento do problema de um número ímpar de partículas se restringirá a estados de senioridade 1 e será feito de duas formas (secção II.4). A primeira acopla o movimento da partícula desemparelhada ao movimento coletivo através do campo gerado pelo próprio caroço coletivo. A segunda projeta a função de onda microscópica de número ímpar de partículas na função de onda coletiva de número par de partículas.



II.1. O HAMILTONIANO

O movimento de partícula independente no núcleo foi proposto por Mayer, Haxel e Jensen (18-19) para explicar os números mágicos nucleares e os estados fundamentais dos nuclídeos ímpares. Tal hipótese é hoje largamente empregada nos mais diversos cálculos de estrutura nuclear.

Sabemos que o núcleo é um sistema pouco denso e que o livre caminho médio de um nucleon dentro do núcleo possui a mesma ordem de grandeza que o raio nuclear⁽⁹⁾. Assim sendo, um nucleon dentro do núcleo pode ser tratado em boa aproximação como uma perturbação do movimento de partícula independente.

Intuitivamente⁽²⁰⁻²¹⁾, esperamos que um nucleon sinta as forças nucleares uniformemente próximo à região central do núcleo e que à medida que se afaste dela sinta as forças de ligação. Na região fora do raio nuclear, definido da forma usual, as forças nucleares devem ter, devido ao seu alcance finito, uma influência quase nula no movimento do nucleon. Um potencial "ad hoc" a ser considerado deve ter ao menos as seguintes características

$$\left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r=0} = 0, \quad \left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r=R_0} > 0 \quad \text{e} \quad \left(\frac{\partial V}{\partial r}\right)_{r>R_0} \approx 0 \quad (\text{II.1.1})$$

Por preencher todos estes requisitos e por possuir a forma da densidade nuclear medida experimentalmente o potencial mais indicado é o de Woods-Saxon. Este, no entanto, não é solúvel analiticamente. Utilizaremos neste trabalho o potencial de oscilador harmônico o qual é solúvel analiticamente, mas apresenta a característica não física de alcance infinito, ligando infinitos estados de partícula. No entanto, por tratarmos sempre estados ligados, restringindo nossa base, este último dá resultados semelhantes aos de Woods-Saxon para funções de onda (apenas a cauda exponencial da função de onda sente a parte não física do potencial $r \gg R_0$)⁽⁹⁾.

Porém, somente uma parte radial para o potencial de partícula independente não dá conta sequer da reprodução dos números mágicos. É necessária a introdução de um termo



de acoplamento spin-órbita⁽¹⁸⁻¹⁹⁾. Até recentemente a origem deste termo com a magnitude a ele atribuída era uma incógnita⁽²²⁾. O estudo de potenciais nucleon-nucleon, ditos realistas, com o uso de mesons escalares e vetoriais dirimiu esta questão.

A base que usaremos será a base usual jm : a parte radial sendo uma função hipergeométrica confluyente e a angular um harmônico esférico mais o coeficiente de acoplamento adequado

$$|N(jm\tau)\rangle = R_{Nl}(r) \sum_{m_l m_s} \langle l m_l \frac{1}{2} m_s | jm \rangle Y_{lm_l}(\Omega) | \frac{1}{2} m_s \rangle \quad (\text{II.1.2})$$

com τ distinguindo protons de neutrons.

Como estamos trabalhando com um potencial de oscilador harmônico há a necessidade de introduzirmos um termo l^2 para posicionarmos corretamente as energias e um termo $\langle l_N^2 \rangle$ para mantermos o centro de massa das camadas de número quântico N . O Hamiltoniano fica⁽²³⁾.

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 - \hbar \omega k (2l \cdot s + \mu (l^2 - \langle l_N^2 \rangle)) \quad (\text{II.1.3})$$

$$\text{com } \langle l_N^2 \rangle = \frac{1}{2} N(N+3)$$

Esta descrição singela é tão mais exata quanto menos partículas (protons ou neutrons) tivermos fora de camada fechada. A medida em que nos afastamos desta situação a interação entre partículas fora da camada fechada perturba significativamente o movimento de partícula independente. Deste modo, as características dos "single-shell" são bastante alteradas. É necessário, então, introduzir no Hamiltoniano uma interação entre dois corpos para dar conta deste efeito.

Este potencial residual de dois corpos pode conter vários ingredientes físicos, podendo ser de complicada resolução. O tratamento auto-consistente de um potencial realístico de dois corpos foge ao objetivo deste trabalho. Procuramos, então, simular os dois principais fenômenos físicos que dominam o movimento de partícula nesta região, através de dois potenciais esquemáticos.

Um deles é a interação de alinhamento, em que as partículas tendem a possuir o maior "overlap" possível entre suas funções de onda. Tal interação provoca uma deformação da superfície nuclear (ver II.3). Este efeito é bem representado pela interação tipo quadrupolo-quadrupolo.

O outro fenômeno é a interação de emparelhamento. É bastante conhecido o efeito de pares de nucleons se acoplarem a momento angular nulo. Este efeito é bem simulado por interações esquemáticas de curtíssimo alcance⁽²⁴⁾. Existindo uma interação de curto alcance entre dois nucleons, estes poderão colidir e espalhar-se em novos orbitais permitidos pelo Princípio de Pauli. Em regiões próximas da superfície de Fermi (nucleons de valência) vários níveis podem ser acessados, de modo que o espalhamento favorece a ocupação de todo o espaço angular fazendo a densidade nuclear tender à esfericidade⁽²⁵⁾. Neste trabalho será utilizada a interação de emparelhamento puro⁽²⁶⁾.

O Hamiltoniano microscópico fica então⁽²¹⁾

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k - \frac{1}{2} \chi \sum_\mu : Q_{\mu z}^\dagger \cdot Q_{\mu z} : - g_c p_c^\dagger p_c \quad (\text{II.1.4})$$

onde o primeiro termo dá a contribuição do campo médio, com c_k^\dagger sendo o operador de criação de partícula no estado quântico rotulado por k ; o segundo termo contém uma ordenação no sentido do produto de Wick, com

$$Q_{\mu z} = \sum_{kk'} \langle k | Y_{2\mu} | k' \rangle c_k^\dagger c_{k'} \quad (\text{II.1.5})$$

e z indicando que a somatória está restrita a estados de protons ou de neutrons; o terceiro termo contém elementos de criação e aniquilação de pares de Cooper⁽²⁷⁾

$$p_c^\dagger = \sum_k c_k^\dagger c_k^\dagger \quad (\text{II.1.6})$$

Este Hamiltoniano foi inicialmente estudado por Kisslinger e Sorensen⁽²⁸⁾ e tem sido objeto de vários estudos nos últimos anos⁽²⁹⁻³⁰⁾. Nas próximas duas seções serão analisados métodos para sua solução.



II.2. O ESTADO FUNDAMENTAL

Nesta secção vamos delinear um método variacional para encontrar o estado fundamental do Hamiltoniano microscópico: o método de Hartree Fock Bogolyubov. A discussão aqui apresentada será baseada no texto de Ring e Schuck⁽²¹⁾.

Se o Hamiltoniano microscópico (II.2.4) se restringisse apenas ao termo de campo médio (termo de um corpo), o estado fundamental de N nucleons seria dado pelo determinante de Slater gerado por:

$$| \rangle = \prod_{i \in \{\varphi\}} c_i^+ | - \rangle \quad (\text{II.2.1})$$

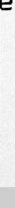
onde $| - \rangle$ é o vácuo puro, c_i^+ é o operador de criação de um nucleon no estado i e $\{\varphi\}$ é o conjunto dos N autoestados de menor energia do campo médio. Assim, $\{\varphi\}$ define o que chamamos de energia de Fermi (λ_f). A excitação do estado fundamental corresponde à atuação de um operador $c_m^+ c_i$ que aniquila um nucleon em um estado com energia menor que a de Fermi ($i \in \{\varphi\}$) e cria outro em um estado de energia maior que a de Fermi ($m \notin \{\varphi\}$).

O operador c_m^+ é usualmente chamado de operador de criação de partícula, enquanto que c_i é o operador de criação de buraco. O estado fundamental deve satisfazer, então, às condições:

$$c_m | \rangle = 0 \quad \text{e} \quad c_i^+ | \rangle = 0 \quad (\text{II.2.2})$$

A ação de uma interação residual de dois corpos pode tanto correlacionar os operadores originais de partícula, como os de buraco, como os de partícula com os de buraco, tornando a tarefa de encontrar o estado fundamental do Hamiltoniano um problema não trivial.

Para simplificar o tratamento desta interação residual introduzimos operadores que tratam de forma equivalente os estados de partícula e os de buraco através da transformação de Bogolyubov generalizada. Estes



operadores tem uma conexão simples com os operadores de partícula e de buraco usuais, dada por :

$$\beta_k^+ = \sum_l U_{lk} c_l^+ + V_{lk} c_l \quad (\text{II.2.3})$$

onde β_k^+ é o operador de criação de quasi-partícula no estado k , c_l^+ é o operador de criação de um nucleon no estado l e l, k percorrem todo espaço de configuração $\{\zeta\}$ de dimensão M . Ou seja, contruimos uma transformação conectando operadores que agem no espaço $2-M$ dimensional.

Na forma matricial temos :

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} = W^+ \begin{pmatrix} c \\ c^+ \end{pmatrix} \quad (\text{II.2.4})$$

Impor que os operadores β e β^+ respeitem as regras de anticomutação de Fermi torna a matriz W unitária. O teorema de Bloch-Messiah⁽³¹⁾ nos diz que uma matriz unitária da forma (II.2.4) pode ser decomposta em três matrizes na forma⁽³²⁾ :

$$W = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c & 0 \\ 0 & c^* \end{pmatrix} \quad (\text{II.2.5})$$

onde $U = D\bar{U}C$ e $V = D^*\bar{V}C$.

O significado desta decomposição é imediato. As submatrizes D e D^* fazem uma transformação unitária dos operadores de buraco (partícula) $c_k (c_k^+)$ em outros operadores de buraco (partícula) $a_n (a_n^+)$. A segunda transformação conecta estados de buraco (partícula) $a_n (a_n^+)$ aos estados de quasi-partícula. Esta transformação é usualmente conhecida como transformação de Bogolyubov-Valatin e possui a forma geral :

$$\alpha_n^+ = u_n a_n^+ - v_n a_{\bar{n}} \quad (n \in \{\eta\}) \quad (\text{II.2.6})$$

com $u_n^2 + v_n^2 = 1$ oriundo da necessidade de W ser unitária. Estas grandezas, v_n^2 e u_n^2 , estão relacionadas à probabilidade de ocupação e não ocupação de um estado. No

caso simples de um campo de um corpo, os operadores de buraco e de partícula são conectados aos de quasi-partícula da forma simples :

$$\alpha_i^+ = a_i \quad (i \in \{\varphi\}) \quad \text{e} \quad \alpha_m^+ = a_m^+ \quad (m \in \{\xi\}) \quad (\text{II.2.7})$$

Finalmente a terceira transformação correlaciona unitariamente as quasi-partículas entre si.

Nosso estado fundamental $|\phi\rangle$ deve agora satisfazer

$$\beta_k^+ |\phi\rangle = 0 \quad \text{para} \quad k \in \{\xi\} = \{\varphi\} + \{\eta\} + \{\xi\} \quad (\text{II.2.8})$$

Um modo de construir este estado fundamental é :

$$|\phi\rangle = \prod_k \beta_k |-\rangle \quad \text{onde} \quad k \in \{\varphi\} + \{\eta\} \quad (\text{II.2.9})$$

pois qualquer operador de aniquilação pertencente a $\{\xi\}$ faria a função identicamente nula. Deste modo, podemos escrever :

$$|\phi\rangle = \prod_i a_i^+ \prod_n (u_n + v_n a_n^+ a_n^+) |-\rangle \quad (\text{II.2.10})$$

onde $n \in \{\eta\}$, ou seja, todos $u_n \neq 0$. Esta separação em uma parte emparelhada e outra "bloqueada" nos permite distinguir o problema de um número par ou ímpar de nucleons dependendo de $\{\varphi\}$ ter um número par ou ímpar de estados.

Em princípio, para um número par de nucleons de senioridade 0, $\{\eta\}$ deveria abranger todo o espaço de configuração. No caso de um campo médio de Woods-Saxon $\{\eta\}$ seria restrito aos estados discretos. Como estamos trabalhando com um potencial de oscilador harmônico devemos impor um limite superior a $\{\eta\}$ gerando um conjunto infinito $\{\xi\}$ de estados ligados. De fato, simplificaremos ainda mais o problema impondo um limite inferior a $\{\eta\}$ gerando um conjunto $\{\varphi\}$ de autofunções do campo médio supostas inertes (apêndice B).

Considerando apenas $\{\eta\}$, nossa função de onda fica

$$|\phi_0\rangle = \prod_k \beta_k |-\rangle \quad \text{onde} \quad k \in \{\eta\} \quad (\text{II.2.11})$$

Por sua vez, estados de senioridade 1 deveriam ter, em princípio, $\{\varphi\}$ com um estado. Esta é a idéia do "blocking" BCS⁽³²⁾. Nosso tratamento envolvendo estados de uma quasi-partícula será, no entanto, simplesmente considerar como o estado fundamental a ação do operador de criação de uma quasi-partícula sobre a solução do problema de 0 quasi-partículas

$$|\varphi_{\pm k}\rangle = \beta_k^\pm |\varphi_0\rangle \quad (\text{II.2.12})$$

Calcularemos a solução do HFB em termos da matriz densidade (ρ) e do tensor de emparelhamento (κ). Estas duas grandezas são dadas por :

$$\rho_{ll'} = \langle \varphi | c_{l'}^\dagger c_l | \varphi \rangle \quad (\text{II.2.13})$$

$$\kappa_{ll'} = \langle \varphi | c_{l'} c_l | \varphi \rangle$$

Podemos então definir a matriz de densidade generalizada

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \quad (\text{II.2.14})$$

A solução do problema (encontrar uma transformação adequada) nos leva a

$$W^{-1} \mathcal{Q} W = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.2.15})$$

Assim, o Hamiltoniano microscópico pode ser expresso em termos da densidade generalizada

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h - \lambda_F + \Gamma & \Delta \\ -\Delta^* & -h + \lambda_F - \Gamma^* \end{pmatrix} \quad (\text{II.2.16})$$

com

$$h_{ll'} = \epsilon_{ll'} \delta_{ll'}$$

$$\Gamma_{ll'} = - \sum_M (-)^M D_M^- \langle l | r^2 Y_{2M} | l' \rangle$$

$$\Delta_{ll'} = -s^l \delta_{\bar{l}l'} \Delta$$

onde

$$D_N = \chi \sum_{\kappa\kappa'} \langle \kappa | r^2 Y_{2M} | \kappa' \rangle \rho_{\kappa'\kappa}$$

$$\Delta = g/2 \sum_k s_k^{\bar{k}} \kappa_{\bar{k}k}$$

e $s^{\bar{k}}$ é a fase devido à reversão temporal do estado \bar{k} . Para simplificar a notação de \mathcal{H} omitimos o índice \bar{k} .

Para chegarmos a este resultado desprezamos os termos de Fock, a parte de emparelhamento que contribui no potencial $\Gamma_{\kappa\kappa'}$, bem como a parte de quadrupolo-quadrupolo que contribui em $\Delta_{\kappa\kappa'}$. Os dois últimos termos são em geral pequenos. Sem esta simplificação o cálculo seria bastante complicado e seria perdido o objetivo inicial da proposta de um Hamiltoniano esquemático.

A partir de (II.2.16) não é difícil resolvermos o problema para o estado fundamental. Esta é dada simplesmente por $h - \lambda_F + \Gamma$ para cada nucleon, mais uma condição de mínimo para a energia total do sistema⁽²¹⁾. Esta solução nada mais é do que o modelo de Nilsson para uma determinada deformação⁽¹⁷⁾.

O método de Hartree Bogolyubov é apropriado para obtermos funções de onda para o estado fundamental. Estados construídos a partir do estado fundamental

$$|\psi\rangle = \beta_{\kappa'}^+ \beta_{\kappa}^+ |\emptyset\rangle \quad (\text{II.2.17})$$

são correlacionados pela ação da interação residual. Em nosso estudo queremos obter os estados excitados do Hamiltoniano (II.1.4) o que tornaria este tipo de abordagem impraticável, de modo que precisamos procurar um tratamento alternativo para o problema.

II.3. O CAROÇO

Apresentaremos agora o método desenvolvido por Kumar e Baranger⁽²²⁾ que nos permite obter, dentro de determinadas hipóteses sobre a dinâmica do movimento, uma Hamiltoniana clássica em termos de coordenadas coletivas

para a interação de quadrupolo-quadrupolo mais emparelhamento. Estas coordenadas coletivas passam a conter todos os graus de liberdade do sistema e a Hamiltoniana devidamente quantizada passa a descrever a dinâmica do sistema.

II.3.i. O ATDHB

Um método para fazer esta redução dos graus de liberdade é através da teoria adiabática de Hartree Bogolyubov dependente do tempo. O ponto de partida deste tratamento é supormos que a função de onda do sistema é sempre um determinante de Slater, porém evoluindo no tempo. Tal determinante é descrito pela matriz densidade \mathcal{R} . Isto nos leva à equação de movimento :

$$i\dot{\mathcal{R}} = [\mathcal{H}, \mathcal{R}] \quad (k=1) \quad (\text{II.3.1})$$

Esta equação tem uma contrapartida imediata na mecânica clássica : as equações de Hamilton. Seguindo esta analogia, se conseguirmos associar uma parte de \mathcal{R} aos momentos e outra às coordenadas podemos, em princípio, descrever o movimento classicamente. Mostrou-se que tal decomposição é possível dentro da aproximação adiabática³³.

Aqui o significado da aproximação adiabática é supor que o movimento coletivo é lento em comparação com o movimento individual dos nucleons no núcleo. Isto nos sugere que para descrevermos o movimento coletivo são necessários apenas alguns poucos graus de liberdade correspondentes a um conjunto de coordenadas coletivas (μ_m).

Embora não tenhamos dito como escolher as coordenadas coletivas, vamos supor que tal escolha já tenha sido feita. Para escrevermos \mathcal{R} em função das mesmas precisamos de um conjunto de estados $\{\eta(\mu_m)\}$ de dimensão duplicada 2-p função das coordenadas coletivas. A solução do problema nos dirá quais as trajetórias ao longo do espaço μ_m que minimizam a energia.

Assim, nossa solução estática é :

$$W(\mu_m)^{-1} \mathcal{H} W(\mu_m) = \begin{pmatrix} e_i(\mu_m) \\ -e_i(\mu_m) \end{pmatrix} \quad (\text{II.3.2})$$

para simplificar a notação consideraremos as duas soluções

$$\mathcal{H} |A_i\rangle = e_i |A_i\rangle \quad \text{e} \quad \mathcal{H} |B_i\rangle = -e_i |B_i\rangle \quad (\text{II.3.3})$$

separadamente.

Uma expansão de \mathcal{R} em função de potências da variação temporal nos leva a

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}^{(0)} + \mathcal{R}^{(1)} + \mathcal{R}^{(2)} + \dots \quad (\text{II.3.4})$$

onde $\mathcal{R}^{(0)}$ é a solução do problema estático

$$\mathcal{R}^{(0)} \mathcal{H} - \mathcal{H} \mathcal{R}^{(0)} = 0 \quad (\text{II.3.5})$$

A hipótese adiabática nos permite truncar tal expansão em boa aproximação em $\mathcal{R}^{(2)}$ e escrever :

$$i \dot{\mathcal{R}}^{(0)} = \mathcal{H} \mathcal{R}^{(1)} - \mathcal{R}^{(1)} \mathcal{H} \quad (\text{II.3.6})$$

o que nos leva a :

$$\begin{aligned} \langle A_i | \mathcal{R}^{(1)} | A_j \rangle &= \langle B_i | \mathcal{R}^{(1)} | B_j \rangle = 0 \\ \langle A_i | \mathcal{R}^{(1)} | B_j \rangle &= -i \langle A_i | \mathcal{H} | B_j \rangle (e_i + e_j)^{-2} \\ \langle B_i | \mathcal{R}^{(1)} | A_j \rangle &= i \langle B_i | \mathcal{H} | A_j \rangle (e_i + e_j)^{-2} \end{aligned} \quad (\text{II.3.7})$$

Os elementos da diagonal principal de $\mathcal{R}^{(2)}$ também serão considerados.

$$\begin{aligned} \langle A_i | \mathcal{R}^{(2)} | A_i \rangle &= \sum_j |\langle A_i | \mathcal{H} | B_j \rangle|^2 (e_i + e_j)^{-4} \\ \langle B_i | \mathcal{R}^{(2)} | B_i \rangle &= \sum_j |\langle B_i | \mathcal{H} | A_j \rangle|^2 (e_i + e_j)^{-4} \end{aligned} \quad (\text{II.3.8})$$

A matriz $\dot{\mathcal{H}}$ é obtida diferenciando (II.2.16) em relação ao tempo

$$\dot{\mathcal{H}} = \begin{pmatrix} -\delta_{ij} \dot{\lambda} - \sum_M \dot{D}_M^* \langle i | Q_M | j \rangle & -\delta_{ij} s^i \dot{\Delta} \\ \delta_{ij} s^i \dot{\Delta} & \delta_{ij} \dot{\lambda} + \sum_M \dot{D}_M \langle i | Q_M | j \rangle^* \end{pmatrix} \quad (\text{II.3.9})$$

Assim, podemos escrever que o valor esperado do Hamiltoniano de muitos corpos, para a função de onda de ATDHB é :

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ij\tau} \frac{|\langle A_{i\tau} | \dot{\mathcal{H}} | B_{i\tau} \rangle|^2}{(e_{i\tau} + e_{j\tau})^3} + \frac{1}{2} \text{Tr}(h) + \\ + (n - \frac{1}{2}\rho) \lambda - \frac{1}{2} \sum_{i\tau} e_{i\tau} + \sum_{\tau} \frac{\Delta^2}{4\tau} + \frac{1}{2} \sum_M \frac{|D_M|^2}{2\chi} \quad (\text{II.3.10})$$

onde o primeiro termo é a energia cinética e os demais compõem a energia potencial coletiva $V(\mu_m)$.

O que nos leva novamente à escolha das coordenadas coletivas. Neste modelo simples a escolha natural seria λ , Δ e D_M os quais a partir da Hamiltoniana (II.3.10) tem cada qual sua equação de movimento. Nesta forma, no entanto, o problema ainda não é tratável computacionalmente. Deste modo vamos impor dois vínculos de movimento, necessários para o cálculo ser exequível :

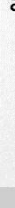
$$\dot{\lambda}_{\tau} = \sum_{\mu} \left(\frac{\partial \lambda_{\tau}}{\partial D_{\mu}} \right) \dot{D}_{\mu} \\ \dot{\Delta}_{\tau} = \sum_{\mu} \left(\frac{\partial \Delta_{\tau}}{\partial D_{\mu}} \right) \dot{D}_{\mu} \quad (\text{II.3.11})$$

de modo que as vibrações de emparelhamento desapareçam como modos genuinamente coletivos, mas vinculados à variação temporal de D_M .

As coordenadas coletivas foram reduzidas a D_M , as quais podem ser escritas no referencial intrínseco como

$$D_{\mu} = \begin{cases} \hbar\omega \beta \cos\gamma & , \mu = 0 \\ \hbar\omega \beta \sin\gamma & , \mu = 2' \end{cases} \quad (\text{II.3.12})$$

mais os ângulos de Euler, onde $\hbar\omega$ é a energia associada ao poço de oscilador harmônico e β, γ são as coordenadas de



Bohr usuais e os eixos intrínsecos são definidos⁽⁴⁾ :

$$\begin{aligned}\beta_0 &= \beta \cos \gamma \\ \beta_2 &= \beta \sin \gamma\end{aligned}\quad (\text{II.3.13})$$

Assim, a solução estática do problema se reduz ao conjunto $\{\eta(\beta, \gamma)\}$, ou seja, a base de Nilsson deformada⁽¹⁷⁾.

Os parâmetros de inércia são dados por :

$$B_{\mu\nu}(\beta, \gamma) = (\hbar\omega)^2 \left\{ \sum_{i \neq j, \tau} (u_{i\tau} v_{j\tau} + v_{i\tau} u_{j\tau})^2 \langle i | Q_{\mu\tau} | j \rangle \times \right.$$

$$\left. + \langle j | Q_{\mu\tau} | i \rangle (e_{i\tau} + e_{j\tau})^{-3} + \sum_{i\tau} [2u_{i\tau} v_{i\tau} (\langle i | Q_{\mu\tau} | i \rangle + \frac{\partial \lambda_\tau}{\partial D_\mu}) + \right.$$

$$\left. + (u_{i\tau}^2 + v_{i\tau}^2) \frac{\partial \Delta_\tau}{\partial D_\mu} \right] [2u_{i\tau} v_{i\tau} (\langle i | Q_{\nu\tau} | i \rangle + \frac{\partial \lambda_\tau}{\partial D_\nu}) +$$

$$\left. + (u_{i\tau}^2 - v_{i\tau}^2) \frac{\partial \Delta_\tau}{\partial D_\mu} \right] (2e_{i\tau})^{-3} \left. \right\} \quad (\text{II.3.14})$$

$$e \quad J_k(\beta, \gamma) = \sum_{ij\tau} (u_{i\tau} v_{j\tau} - v_{i\tau} u_{j\tau}) \frac{|\langle i | J_k | j \rangle|^2}{(e_{i\tau} + e_{j\tau})} \quad (\text{II.3.15})$$

enquanto que a energia potencial é dada por :

$$V(\beta, \gamma) = \sum_{i\tau} v_{i\tau}^2 \epsilon_{i\tau} - \sum_{\tau} \frac{\Delta_\tau^2}{g_\tau} + \frac{1}{2} \sum_M \frac{|D_M|^2}{\chi} \quad (\text{II.3.16})$$

onde τ é a projecção do isospin e J_k é a componente k do operador de momento angular. As derivadas de λ_τ e Δ_τ em relação à deformação foram calculadas por Bès⁽³⁴⁾.

II.3.ii. O Hamiltoniano Coletivo

Uma vez determinados os parâmetros da Hamiltoniana clássica em termos das coordenadas coletivas, temos :

$$H_{\text{clássica}} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} J_i(\beta_0, \beta_2) \dot{\omega}_i^2 + \frac{1}{2} B_{00}(\beta_0, \beta_2) \dot{\beta}_0^2 +$$

$$+ B_{02}(\beta_0, \beta_2) \dot{\beta}_0 \dot{\beta}_2 + \frac{1}{2} B_{22}(\beta_0, \beta_2) \dot{\beta}_2^2 + V(\beta_0, \beta_2) \quad (\text{II.3.17})$$

que é uma extensão imediata da Hamiltoniana mecanicista proposta por Bohr⁽¹⁾. Esta Hamiltoniana precisa ser quantizada devido à natureza quântica dos fenômenos que

queremos descrever. Para tal, seguiremos a prescrição de Pauli-Podolsky⁽²²⁾, onde :

$$H = \frac{1}{2} \sum_{mn} G_{mn}(a) \dot{a}_m \dot{a}_n + V \quad (\text{II.3.18})$$

se transforma no operador

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{mn} |G|^{-1/2} \frac{\partial}{\partial a_m} |G|^{1/2} G^{mn} \frac{\partial}{\partial a_n} + V \quad (\text{II.3.19})$$

onde G é o determinante da matriz G_{mn} e G^{mn} é a matriz inversa, com o elemento de volume dado por :

$$d\mathcal{V} = |G|^{1/2} \prod_n da_n \quad (\text{II.3.20})$$

Os autovalores deste Hamiltoniano serão expandidos na base rotacional generalizada :

$$|\alpha R M_R\rangle = \sum_{\substack{N \geq 0 \\ \text{par}}} \left[\frac{2R+1}{16\pi^2(1+\delta_{N0})} \right]^{1/2} \left\{ \mathcal{D}_{M_R N}^R(\Omega) + (-)^N \mathcal{D}_{M_R -N}^R(\Omega) \right\} A_{RN}^\alpha(\beta, \gamma) \quad (\text{II.3.21})$$

onde R é o momento angular do caroço e α é um número quântico adicional que rotula estados de mesmo momento angular.

O método numérico para a resolução deste problema nesta base, proposto por Kumar e Baranger⁽⁴⁾, discretiza o plano β, γ e busca através de um procedimento variacional os valores de $A_{RN}^\alpha(\beta, \gamma)$ que minimizam $\langle \alpha R M_R | H | \alpha R M_R \rangle$ preservando a normalização de $\langle \alpha R M_R | \alpha R M_R \rangle$.

II.4. O ACOPLAMENTO

No tratamento do núcleo par usamos uma função de onda microscópica expressa em termos das coordenadas β e γ . No apêndice B mostramos como obtê-la sem justificarmos o Hamiltoniano de interação. É este Hamiltoniano que acopla o movimento individual dos nucleons às coordenadas coletivas e constitui um dos pontos centrais deste modelo. Mostraremos nesta secção sua origem.

A hipótese central é de que podemos descrever a superfície nuclear do caroço⁽¹⁻³⁾ através da equação

$$R(R, \theta, \varphi) = R_0 \left(1 + \sum_{\mu} \alpha_{2\mu} Y_{2\mu}^* \right) \quad (\text{II.4.1})$$

Partindo desta expressão, supomos que as superfícies equipotenciais, geradas por esta distribuição de massa, guardam o comportamento angular da superfície nuclear, ou seja

$$r(r, \theta, \varphi) = r \left(1 + \sum_{\mu} \alpha_{2\mu} Y_{2\mu}^* \right) \quad (\text{II.4.2})$$

Assim, o potencial de partícula independente ao invés do contido na expressão (II.1.3)

$$V_0(r, \ell, \mathcal{S}) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 + C \ell, \mathcal{S} + D (\ell^2 - \langle \ell_N^2 \rangle) \quad (\text{II.4.3})$$

será

$$V(r, \ell, \mathcal{S}) = V_0 \left(\frac{r}{1 + \sum_{\mu} \alpha_{2\mu} Y_{2\mu}^*}, \ell, \mathcal{S} \right) \quad (\text{II.4.4})$$

O acoplamento é definido como a perturbação do movimento de partícula causado pelo campo gerado pelo caroço coletivo, ou seja

$$H_{\text{acopl}} = V(r, \ell, \mathcal{S}) - V_0(r, \ell, \mathcal{S}) \quad (\text{II.4.5})$$

Expandindo H_{acopl} em torno de α_2 em série de Taylor até a 2ª ordem chegamos à expressão⁽²²⁻³⁷⁾

$$H_{\text{acopl}} = -M\omega^2 r^2 \left\{ \sqrt{5} [\alpha_2 Y_2]_0 - \frac{15}{4\sqrt{7}} \sum_J \langle 2020 | J0 \rangle [(\alpha_2 \alpha_2) Y_J]_0 \right\} \quad (\text{II.4.6})$$

O primeiro termo desta expansão multipolar é uma interação quadrupolo-quadrupolo entre a quasi-partícula e o caroço, ou seja uma perturbação do movimento de partícula independente tipo Nilsson⁽¹⁷⁾ sem simetria axial.

Sendo o Hamiltoniano de acoplamento um escalar a expansão multipolar pode ser escrita de uma forma bastante

mais sugestiva :

$$H_{\text{acopl}} = -M\omega^2 \sum_{J\mu} r^2 Y_{J\mu}^* T_{J\mu} \quad (\text{II.4.7})$$

Comparando ambas expressões resulta que :

$$T_{J\mu} = \delta_{J,2} \alpha_{2\mu} + y_J (\alpha_2 \alpha_2)_{J\mu} \quad (\text{II.4.8})$$

com $y_0 = -\frac{15}{4\sqrt{5\pi}}$, $y_1 = y_3 = 0$ e $y_2 = -y_4 = \frac{15\sqrt{2}}{4\sqrt{35\pi}}$.

Para a cálculo da função de onda microscópica (apêndice B) truncamos a expansão no primeiro termo.

Voltemos agora a considerar o problema de um número ímpar de partículas de senioridade 1. Neste caso o Hamiltoniano microscópico será tratado como :

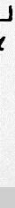
$$H_{\text{microscópico}} = H(A \text{ nucleons}) + H(A-1 \text{ nucleons}) + H(1 \text{ nucleon}) \quad (\text{II.4.9})$$

$$\begin{array}{ccc} \downarrow & \downarrow & \downarrow \\ H_{\text{coletivo}} & H_{\text{acopl}} & H_{\text{part}} \end{array}$$

Esta separação não é trivial, pois a somatória no Hamiltoniano microscópico é feita nos estados e não nas partículas e deste modo estaríamos tratando uma partícula distintamente das outras sem usar um método tipo "blocking". Foi provado, no entanto, que tal separação é possível em certos casos⁽³⁶⁾. Em nosso estudo, (II.4.9) está contida na secção II.2 quando supusemos (II.2.12) de forma não autoconsistente.

II.5. AS BASES

Desde trabalhos pioneiros de Bohr⁽¹⁾, Bohr e Mottelson⁽¹⁰⁾ e de Shalit⁽¹¹⁾ tem-se tratado o problema do acoplamento de uma quasi-partícula a um núcleo nos limites rotacional ou vibracional. Estas situações limites permitem a explicação de espectros de excitação de muitos isótopos ímpares. Remanescem inexplicadas, no entanto, várias regiões da carta de nuclídeos.



No limite vibracional, é usual ser utilizada a base acoplada esférica, ou seja, a base que acopla os momentos angulares de partícula e de caroço no referencial de laboratório :

$$|IM\alpha RNlj\rangle = [1\alpha R \beta_{Nlj}^+]_{IM} |BCS\rangle \quad (II.5.1)$$

onde I é o momento angular total do estado da base considerado; M é a projeção de I no eixo "z" do sistema de laboratório; α é o conjunto de números quânticos que rotula o estado de momento angular R do caroço; N, l e j são os números quânticos usuais de estados de partícula independente.

Esta é a base natural no caso vibracional uma vez que temos a solução analítica para o movimento coletivo vibracional no sistema de laboratório.

No limite rotacional, partimos da função de onda de quasi-partícula no referencial intrínseco e a projetamos em momento angular no referencial de laboratório⁽³⁰⁾. Levando em conta que o momento angular do caroço não possui projeções ímpares no eixo "3", que nossa somatória em Ω está restrita a $(-)^{\Omega-1/2} = 1$ e que nos restringimos a estados de $k \geq 1/2$, a base é dada por :

$$|IMki\beta\gamma\rangle = \sqrt{\frac{2I+1}{16\pi^2}} \left\{ \mathcal{D}_{Mk}^I \alpha_i^+ |BCS\rangle + (-)^{I-k+l} \mathcal{D}_{M-k}^I \alpha_i^+ |BCS\rangle \right\}$$

para $(-)^{k-1/2} = 1$

(II.5.2)

e

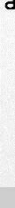
$$|IMki\beta\gamma\rangle = \sqrt{\frac{2I+1}{16\pi^2}} \left\{ \mathcal{D}_{Mk}^I \alpha_i^+ |BCS\rangle + (-)^{I-k+l+1} \mathcal{D}_{M-k}^I \alpha_i^+ |BCS\rangle \right\}$$

para $(-)^{k-1/2} = -1$

onde omitimos a dependência em Ω , pois tomamos o limite de deformação extrema (distribuição concentrada em torno de um ponto Ω')⁽²¹⁾.

A base deformada é a base natural para tratarmos o limite rotacional, uma vez que o Hamiltoniano coletivo

$$H_{\text{coletivo}} \rightarrow \text{rotacional} = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2J_i} R_i^2 \quad (II.5.3)$$



onde \hat{R} é o operador de momento angular do caroço, pode ser escrito como :

$$H_{\text{coletivo}} \rightarrow \text{rotacional} = \sum_{i=1}^3 \frac{\hbar^2}{2J_i} (I_i - j_i)^2 \quad (\text{II.5.4})$$

onde \hat{I} e \hat{j} são os operadores de momento angular do sistema e da quasi-partícula desemparelhada respectivamente e sendo estes tratados diretamente na base deformada.

O fato de possuímos bases naturais para os limites do Hamiltoniano de Bohr não nos impede de fazermos a diagonalização em outra base. De fato, há uma transformação unitária que conecta ambas as bases (39). Podemos recuperar os números quânticos esféricos da quasi-partícula desemparelhada fazendo a projeção no sistema de laboratório

$$C_{Nljm}^+ = \sum_{\Omega} \mathcal{D}_{m\Omega}^j \sum_i W_{Nlj\Omega}^i a_i \quad (\text{II.5.5})$$

onde os símbolos tem o mesmo significado que no apêndice B. Partindo daí é fácil obter os elementos de conexão entre as bases lembrando da fórmula (II.3.21) :

$$\begin{aligned} \langle IMki\beta\gamma | IM\alpha RNlj \rangle &= \langle IMki\beta\gamma | \sum_{H_{RM}} \langle RM_R j m | IM \rangle \times \\ &\times \sum_{N \geq 0} A_{RN}^{\alpha}(\beta, \gamma) \left[\frac{2R+1}{16\pi^2(1+\delta_{N0})} \right]^{\frac{1}{2}} (\mathcal{D}_{\frac{1}{2}R}^R + (-)^R \mathcal{D}_{\frac{1}{2}R}^R) \sum_{\Omega} \mathcal{D}_{m\Omega}^j \beta_{Nlj\Omega}^+ |BCS \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.5.6})$$

Resultando para $(-)^{k-\frac{1}{2}} = 1$:

$$\begin{aligned} \langle IMki\beta\gamma | IM\alpha RNlj \rangle &= \sqrt{\frac{2R+1}{2I+1}} \sum'_{\Omega} \langle R+k-\Omega j\Omega | IK \rangle \times \\ &\times [1 + \delta_{\Omega-k,0}]^{\frac{1}{2}} (A_{Rk-\Omega}^{\alpha} W_{Nlj\Omega}^i + (-)^R A_{R\Omega-k}^{\alpha} W_{Nlj\Omega}^i) \end{aligned} \quad (\text{II.5.7})$$

e para $(-)^{k-\frac{1}{2}} = -1$:

$$\begin{aligned} \langle IMki\beta\gamma | IM\alpha RNlj \rangle &= \sqrt{\frac{2R+1}{2I+1}} \sum'_{\Omega} \langle R-k-\Omega j\Omega | IK \rangle \times \\ &\times [1 + \delta_{\Omega+k,0}]^{\frac{1}{2}} (A_{R-k-\Omega}^{\alpha} W_{Nlj\Omega}^i + (-)^R A_{Rk+\Omega}^{\alpha} W_{Nlj\Omega}^i) \end{aligned} \quad (\text{II.5.8})$$

Onde, então, está a diferença em tratarmos o problema na base deformada ou na base esférica? Para

respondermos esta pergunta precisamos reinterpretar as bases no contexto deste modelo.

A função de onda macroscópica foi obtida no referencial de laboratório, mas devemos nos lembrar que ela pode ser associada a uma função microscópica ao longo do plano β, γ . Cada estado possui uma amplitude A_{RN}^α diferente ao longo do plano β, γ e conseqüentemente possui $\langle \beta \rangle$ e $\langle \gamma \rangle$ diferentes.

No caso da base esférica calculamos a quasi-partícula a partir do campo médio original (II.1.3) mais a interação de emparelhamento. Deste modo estamos em uma situação fora do mínimo para o termo de quasi-partícula. Esperamos que a ação do Hamiltoniano de acoplamento efetivo nos coloque novamente no mínimo.

No caso da base deformada, cada ponto do plano β, γ é a solução do Hamiltoniano (II.3.2). Assim, a solução será obtida a partir de como a função de onda macroscópica (A_{RN}^α) se distribui ao longo do plano β, γ .

As duas bases aqui apresentadas possuem também uma característica diferente em sua estrutura, uma vez que a primeira é rotulada por variáveis pertencentes ao espaço discreto (I, M, α , R, N, l, j), enquanto que a segunda é rotulada tanto por variáveis pertencentes ao espaço discreto (I, M, K, i) quanto ao contínuo (β, γ). Isto implica que a transformação unitária que conecta as duas bases envolve uma mudança de representação⁴⁰.

O conjunto completo para a base do acoplamento esférico é dado por :

$$P_{be} = \sum_{\alpha RNlj} |IM\alpha RNlj\rangle \langle IM\alpha RNlj| \quad (II.5.9)$$

enquanto que o conjunto completo para a base do acoplamento deformado é dada por :

$$P_{bd} = \sum_{ki} \int |IMki\beta\gamma\rangle dV_{\beta\gamma} \langle IMki\beta\gamma| \quad (II.5.10)$$

II.6. A DIAGONALIZAÇÃO

Cada abordagem distinta do problema do acoplamento faz uso de uma base diferente visando objetivos diferentes :

- i. Usando a base de acoplamento esférico - estudar o efeito das ordens mais altas do Hamiltoniano de acoplamento no espectro de baixa energia de núclídeos ímpares.
- ii. Usando a base de acoplamento deformado - estudar o efeito do acoplamento de uma quasi-partícula a um caroço de Bohr no referencial intrínseco.

Estes dois tratamentos envolvem métodos de diagonalização distintos. O primeiro⁽¹⁴⁾ chamaremos de diagonalização direta, pois os estados de partícula são os de "shell-model" esférico diretamente acoplados ao caroço de Bohr no sistema de laboratório. O segundo denominaremos de diagonalização com projeção, pois embora a base de diagonalização seja a mesma há uma projeção dos estados de partícula do referencial intrínseco no referencial de laboratório.

II.6.i. A Diagonalização Direta (DD)

O cálculo que aqui será apresentado parte da derivação do Hamiltoniano de acoplamento efetivo para o caso de um potencial de partícula independente de oscilador harmônico como campo médio microscópico. O tratamento, no entanto, é geral podendo ser usado outro campo médio, o qual nos levará a outro Hamiltoniano de acoplamento.

Partindo da expressão (II.4.7), podemos escrever H_{acopl} no espaço de ocupação⁽¹⁴⁾ :

$$H_{acopl} = -M\omega^2 \sum_{J\mu} \sum_{\substack{j m \\ j' m'}} (-)^{j-m} \begin{pmatrix} j & J & j' \\ -m & \mu & m' \end{pmatrix} \langle Nlj || r^2 Y_J || Nl'j' \rangle \times \quad (II.6.1)$$

$$\times (-)^{\mu} T_{J\mu} C_{Nljm}^+ C_{Nl'j'm'}$$

onde C_{Nljm}^\dagger é o operador de criação de partícula no estado N, l de spin j e projeção m no eixo "z" do referencial de laboratório.

A equação secular pode ser escrita diretamente, uma vez que tanto a parte de partícula como a referente ao caroço foram previamente resolvidas.

$$\begin{aligned} \langle IM\alpha RNlj | H | IM\alpha' R'N'l'j' \rangle &= \langle IM\alpha RNlj | H_{part} + H_{acopl} + H_{car} | IM\alpha' R'N'l'j' \rangle = \\ &= (e_{Nlj} + E_R^\alpha) \delta_{NN'} \delta_{ll'} \delta_{jj'} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{RR'} + M\omega^2 (-)^{I+j-R} (u_{Nlj} u_{N'l'j'} - \\ &+ u_{Nlj} u_{N'l'j'}) \sum_J W(RjR'j'; IJ) \langle Nlj || Y_J || N'l'j' \rangle \langle \alpha R || T_J || \alpha' R' \rangle \end{aligned} \quad (II.6.2)$$

onde e_{Nlj} é a energia de quasi-partícula no estado $|N l j\rangle$ e E_R^α é a energia do caroço no estado $|R\alpha\rangle$.

O elemento reduzido de matriz envolvendo T é dado pela expressão :

$$\begin{aligned} \langle \alpha R || T_J || \alpha' R' \rangle &= \frac{1}{2} \sqrt{2R+1} \sum_{\substack{NN'V \\ \text{par}}} [(1+\delta_{N0})(1+\delta_{N'0})]^{1/2} \langle RN | R'N'JV \rangle \times \\ &\times \int dV_{\beta\gamma} A_{RN}^{*\alpha} T_{JV}^{(int)} A_{R'N'}^{\alpha'} \end{aligned} \quad (II.6.3)$$

Lembrando da expressão (II.4.8) podemos escrever diretamente que o tensor T no referencial intrínseco é :

$$T_{J\mu}^{(int)} = \delta_{J2} \alpha_{2\mu}^{(int)} + Y_J (\alpha_2^{(int)} \alpha_2^{(int)})_{J\mu} \quad (II.6.4)$$

Aqui o acoplamento se dá através dos momentos de quadrupolo coletivos, ou seja, a quasi-partícula desemparelhada sente a média do caroço ao longo do plano β, γ . Desta forma, levando em conta a hipótese da secção II.2, se tivéssemos todos elementos de matriz coletivos e energias medidos experimentalmente para o núcleo par vizinho, o modelo se reduziria, no caso de primeira ordem no acoplamento, à solução da equação secular descrita acima.

Assim os autovetores após a diagonalização serão dados por :

$$|IM\rangle = \sum_{\alpha RNlj} C_{\alpha RNlj}^{IM} |IM\alpha RNlj\rangle \quad (II.6.5)$$



II.6.ii. A Diagonalização com Projecção (DP)

Neste caso o Hamiltoniano de acoplamento age diretamente nas funções de onda de partícula no referencial intrínseco. Como a diagonalização será feita na base do acoplamento esférico, lançaremos mão do conjunto completo dado pela expressão (II.5.7). Os elementos de matriz que compõem a equação secular são dados por :

$$\begin{aligned} \langle IM\alpha RNlj | H | IM\alpha' R' N' l' j' \rangle &= \langle IM\alpha RNlj | H_{part} + H_{acopl} + H_{col} | IM\alpha' R' N' l' j' \rangle \\ &= E_R^\alpha \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{RR'} \delta_{NN'} \delta_{ll'} \delta_{jj'} + \int \int \sum_{\substack{\beta\gamma\beta' \gamma' \\ \kappa i \\ \kappa' i'}} \langle IM\alpha RNlj | IM\kappa i \beta\gamma \rangle dV_{\beta\gamma} \times \\ &\quad \times \langle IM\kappa i \beta\gamma | H_{acopl} + H_{part} | IM\kappa' i' \beta'\gamma' \rangle dV_{\beta'\gamma'} \langle IM\kappa' i' \beta'\gamma' | IM\alpha' R' N' l' j' \rangle \end{aligned} \quad (II.6.6)$$

Sabemos ainda que :

$$\langle IM\kappa i \beta\gamma | H_{acopl} + H_{part} | IM\kappa' i' \beta'\gamma' \rangle = e_i(\beta,\gamma) \frac{\delta(\beta-\beta') \delta(\gamma-\gamma')}{f(V_{\beta\gamma})} \quad (II.6.7)$$

onde $e_i(\beta,\gamma)$ é a energia de quasi-partícula nas coordenadas β,γ e $f(V_{\beta\gamma})$ é o elemento de volume de normalização.

Resulta daí :

$$\begin{aligned} \langle IM\alpha RNlj | H | IM\alpha' R' N' l' j' \rangle &= E_R^\alpha \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{RR'} \delta_{NN'} \delta_{ll'} \delta_{jj'} + \\ &+ \int \int \sum_{\beta\gamma \kappa i} dV_{\beta\gamma} \langle IM\alpha RNlj | IM\kappa i \beta\gamma \rangle e_i(\beta\gamma) \langle IM\kappa i \beta\gamma | IM\alpha' R' N' l' j' \rangle \end{aligned} \quad (II.6.8)$$

Neste ponto fica clara a diferença entre os dois métodos. Aqui a quasi-partícula é sensível aos momentos de quadrupolo de cada ponto de β,γ e a diagonalização leva em conta as energias de quasi-partícula nos mesmos.

Como a base de diagonalização é a mesma do tratamento anterior os autovetores da equação secular (II.6.8) também serão expressos por (II.6.5).



II.7. OS OBSERVÁVEIS

Neste trabalho efetuamos cálculos para energias, elementos de matriz de quadrupolo elétrico e elementos de matriz de dipolo magnético. As energias são obtidas diretamente da diagonalização do Hamiltoniano. Passaremos à descrição dos procedimentos para a obtenção dos demais observáveis.

II.7.i Elementos de Matriz de Quadrupolo Elétrico

A estrutura da base de diagonalização separa o problema em dois espaços, o coletivo e o de partícula, conectados por um coeficiente de Clebsch-Gordan. O operador de quadrupolo deve, portanto, ter duas partes, cada uma agindo no espaço apropriado.

$$M(E2, \mu) = M_{part}(E2, \mu) + M_{col}(E2, \mu) \quad (II.7.1)$$

Neste trabalho, usaremos para a parte coletiva a expansão em 1ª ordem em $\alpha_{2\mu}$ do operador de quadrupolo coletivo⁽²²⁾, ficando com:

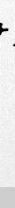
$$M(E2, \mu) = e_{ef}^z r^2 Y_{2\mu} + \frac{3}{4\pi} z R_0^2 \alpha_{2\mu}^* \quad (II.7.2)$$

onde e_{ef}^z é a carga efetiva da quasi-partícula e R_0 é dado pela fórmula empírica $R_0 = 1.2 A^{1/3}$.

Não levaremos em conta, com o objetivo de simplificar os cálculos, a função de onda microscópica do caroço^(8,27), tal simplificação é justificada, ainda, no capítulo III.

A ação dos elementos da base sobre o operador de partícula nos leva no caso da diagonalização direta aos elementos de matriz reduzidos:

$$\langle I' \alpha' R' N' | j' \rangle M_{part} \langle I \alpha R N | j \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{RR'} (-)^{I'+j+R} e_{ef}^z \times \\ \times (u_{N' l' j'} u_{N l j} - v_{N' l' j'} v_{N l j}) \langle N l j || r^2 Y_2 || N' l' j' \rangle W(I' j' I j; R 2) \quad (II.7.3)$$



e no caso da diagonalização com projeção a :

$$\langle I\alpha R N | j \parallel \mathcal{M}_{part}^{(E2)} \parallel I'\alpha' R' N' | l' j' \rangle = \sum_{\substack{\kappa i \\ \kappa' i'}} \int dV_{\beta\gamma} \langle I M \alpha R N | j \parallel I M \kappa i \beta \gamma \rangle \times \\ \times \langle I \kappa i \beta \gamma \parallel \mathcal{M}_{part}^{(E2)} \parallel I' \kappa' i' \beta \gamma \rangle \langle I' M' \kappa' i' \beta \gamma \parallel I' M' \alpha' R' N' | l' j' \rangle \quad (II.7.4)$$

com :

$$\langle I \kappa i \beta \gamma \parallel \mathcal{M}_{part}^{(E2)} \parallel I' \kappa' i' \beta \gamma \rangle \frac{u u'}{d d'} = e_{ef}^z \sqrt{2I'+1} \sum_{\nu} \{ \langle I' \kappa' 2 \pm \nu | I \kappa \rangle \times \\ \times (u_i u_{i'} - v_i v_{i'}) \langle i | r^2 Y_{2\nu} | i' \rangle + \langle I' \kappa' 2 \mu | I \kappa \rangle \delta_{ii'} \sum_{\tau} 2\tau^2 \langle \tau | r^2 Y_{2\nu} | \tau \rangle + \\ + (-)^{I-\frac{1}{2}+l} \langle I' \kappa' 2 \mp \nu | I - \kappa \rangle (u_i u_{i'} - v_i v_{i'}) \langle i | r^2 Y_{\nu} | i' \rangle \} \quad (II.7.5)$$

$$\langle I \kappa i \beta \gamma \parallel \mathcal{M}_{part}^{(E2)} \parallel I' \kappa' i' \beta \gamma \rangle \frac{u d'}{d u'} = e_{ef}^z \sqrt{2I'+1} \sum_{\nu} \{ \langle I' \kappa' 2 \pm \nu | I \kappa \rangle \times \\ \times (u_i u_{i'} - v_i v_{i'}) \langle i | r^2 Y_{2\nu} | i' \rangle + \langle I' \kappa' 2 \pm \nu | I - \kappa \rangle (-)^{I-\frac{1}{2}+l} (u_i u_{i'} - v_i v_{i'}) \\ \times \langle i | r^2 Y_{2\nu} | i' \rangle + (-)^{I-\frac{1}{2}+l} \langle I' \kappa' 2 \nu | I - \kappa \rangle \delta_{ii'} \sum_{\tau} 2\tau^2 \langle \tau | r^2 Y_{2\nu} | \tau \rangle \} \quad (II.7.6)$$

onde a somatória em τ percorre todos os estados diretos, u vale para $(-)^{k-\frac{1}{2}} = 1$ e d vale para $(-)^{k-\frac{1}{2}} = -1$. A presença de K é uma necessidade da mudança de base. Os elementos de matriz envolvendo estados \underline{i} são dados por

$$\langle i | \mathcal{T}_{\kappa\nu} | i' \rangle = \sum_{\substack{N l j \Omega \\ N' l' j' \Omega'}} W_{N l j \Omega}^i W_{N' l' j' \Omega'}^{i'} (-)^{j-\Omega'} \begin{pmatrix} j' & \kappa & j \\ -\Omega' & \nu & \Omega \end{pmatrix} \langle N' l' j' | \mathcal{T}_{\kappa} | N l j \rangle \quad (II.7.6)$$

A ação dos elementos da base sobre o operador coletivo nos leva em ambos os casos a

$$\langle I R \alpha N | j \parallel \mathcal{M}_{col}^{(E2)} \parallel I' \alpha' R' N' | l' j' \rangle = \delta_{NN'} \delta_{ll'} \delta_{jj'} (-)^{R+I-j} \frac{3}{4\pi} Z R_0^2 \times \\ \times [(2I+1)(2I'+1)]^{\frac{1}{2}} W(I R I' R' j j 2) \langle \alpha R \parallel \alpha_2 \parallel \alpha' R' \rangle \quad (II.7.7)$$

onde o elemento de matriz reduzido para α_2 é calculado da mesma forma que em (II.6.3).

Assim, ficamos com :

$$\langle I \parallel \mathcal{M}^{(E2)} \parallel I' \rangle = \sum_{\substack{\alpha R N | j \\ \alpha' R' N' | j'}} C_{\alpha R N | j}^I C_{\alpha' R' N' | j'}^{I'} \langle I \alpha R N | j \parallel \mathcal{M}_{part}^{(E2)} \parallel I' \alpha' R' N' | j' \rangle + \mathcal{M}_{col}^{(E2)} \parallel I \alpha' R' N' | j' \rangle \quad (II.7.8)$$

Finalmente, o momento de quadrupolo estático é dado por :

$$Q_I = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \begin{pmatrix} I & 2 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix} \langle I \| \mathcal{M}(E2) \| I \rangle \quad (\text{II.7.9})$$

e a velocidade de transição reduzida por :

$$B(E2; I_i \rightarrow I_f) = \frac{1}{2I_i+1} |\langle I_f \| \mathcal{M}(E2) \| I_i \rangle|^2 \quad (\text{II.7.10})$$

II.7.ii. Elementos de matriz de dipolo magnético

Assim como no caso elétrico escreveremos o operador de dipolo magnético decomposto em dois espaços :

$$\mathcal{M}(M1, \mu) = \mathcal{M}_{\text{part}}(M1, \mu) + \mathcal{M}_{\text{col}}(M1, \mu) \quad (\text{II.7.11})$$

Considerando para a parte coletiva um operador macroscópico, ficamos com :

$$\mathcal{M}(M1, \mu) = \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \mu_n [g_R \hat{R}_\mu + (g_l^z \hat{j}_\mu + (g_s^z - g_l^z) \hat{s}_\mu)] \quad (\text{II.7.12})$$

onde μ_n é o magneton nuclear, $g_R = Z/A$ e $g_{l,s}^z$ são as constantes giromagnéticas usuais para prótons e neutrons⁽³⁸⁾, \hat{R} é o operador de momento angular do caroço, \hat{j} e \hat{s} são os operadores de momento angular total e de spin da partícula desemparelhada respectivamente.

Denominaremos

$$\hat{G} = g_l^z \hat{j}_\mu + (g_s^z - g_l^z) \hat{s}_\mu \quad (\text{II.7.13})$$

Destarte teremos para o operador de partícula no caso da diagonalização direta :

$$\begin{aligned} \langle I\alpha RN(j \| \mathcal{M}_{\text{part}}(M1) \| I'\alpha' R' N' l' j') \rangle &= \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{RR'} \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \mu_n (-)^{I'-j+R} \times \\ &\times (U_{Nl'j} U_{Nl'j'} + U_{Nlj} U_{Nl'j'}) \langle Nlj \| \hat{G} \| N'l'j' \rangle W(I'j' I j; R1) \end{aligned} \quad (\text{II.7.14})$$

e no caso da diagonalização com projeção a :

$$\begin{aligned} \langle I K i \beta \gamma \| \mathcal{M}_{part}(M_1) \| I' K' i' \beta' \gamma' \rangle_{du'}^{uu'} &= \mu_n \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{2I+1} \times \\ &\times \sum_{\nu} \left\{ \pm \langle I' K' 1 \pm \nu | I K \rangle (u_i u_{i'} + v_i v_{i'}) \langle i | \mathcal{G}_{\nu} | i' \rangle + \right. \\ &\quad \left. \mp \langle I' K' 1 \mp \nu | I K \rangle (-)^{I-\frac{1}{2}+l} (u_i u_{i'} + v_i v_{i'}) \langle i | \mathcal{G}_{\nu} | i' \rangle \right\} \end{aligned} \quad (II.7.15)$$

$$\begin{aligned} \langle I K i \beta \gamma \| \mathcal{M}_{part}(M_1) \| I' K' i' \beta' \gamma' \rangle_{du'}^{ud'} &= \mu_n \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \sqrt{2I+1} \times \\ &\times \sum_{\nu} \left\{ \pm \langle I' K' 1 \pm \nu | I K \rangle (u_i u_{i'} + v_i v_{i'}) \langle i | \mathcal{G}_{\nu} | i' \rangle \right\} \end{aligned}$$

onde valem as mesmas convenções de (II.7.5).

A ação dos elementos da base sobre o operador coletivo em ambos os casos nos leva a :

$$\begin{aligned} \langle I \alpha R N l j \| \mathcal{M}_{col}(M_1) \| I' \alpha' R' N' l' j' \rangle &= \delta_{NN'} \delta_{ll'} \delta_{jj'} \left(\frac{3}{4\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \mu_n g_R d_{RR'} \times \\ &\times [(2I+1)(2I'+1)R(R+1)]^{\frac{1}{2}} W(I' j 1 R; R I) \end{aligned} \quad (II.7.16)$$

Assim, ficamos com :

$$\langle I \| \mathcal{M}(M_1) \| I' \rangle = \sum_{\substack{\alpha R N l j \\ \alpha' R' N' l' j'}} C_{\alpha R N l j}^I C_{\alpha' R' N' l' j'}^{I'} \langle I \alpha R N l j \| \mathcal{M}(M_1) \| I' \alpha' R' N' l' j' \rangle \quad (II.7.17)$$

Finalmente, o momento magnético é dado por :

$$\mu_I = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \begin{pmatrix} I & 1 & I \\ -I & 0 & I \end{pmatrix} \langle I \| \mathcal{M}(M_1) \| I \rangle \quad (II.7.18)$$

e a velocidade de transição reduzida por :

$$B(M_1; I_i \rightarrow I_f) = \frac{1}{2I_i+1} |\langle I_f \| \mathcal{M}(M_1) \| I_i \rangle|^2 \quad (II.7.18)$$

III. OS CÁLCULOS

Cosa fare, se cosi è.

(N. Macchiavelli)

Os cálculos realizados envolvem várias etapas sucessivas. Relacionaremos abaixo a seqüência de etapas para o cálculo dos níveis de energia de um núcleo ímpar, bem como os códigos de computador correspondentes.

Para o núcleo par vizinho :

- i. Cálculo dos parâmetros macroscópicos a serem usados no Hamiltoniano de Bohr partindo do Hamiltoniano microscópico de quadrupolo-quadrupolo mais emparelhamento — MICRO
- ii. Resolução do Hamiltoniano coletivo — MACRO

Para o núcleo ímpar em estudo :

- iii. Acoplamento da quasi-partícula :
 - através da diagonalização direta (DD) — INTER
 - através da diagonalização com projeção (DP) — ACOPL
- iv. Cálculo das velocidades de transição no caso da diagonalização direta — TRINT

Os códigos MICRO e MACRO foram desenvolvidos pelo Prof. Dr. M.T.F.da Cruz^(*). Todos os programas foram processados no CDC do Centro de Computação Eletrônica da USP. No caso da diagonalização com projeção (DP) não foi desenvolvido um código para o cálculo das velocidades de transição porque uma estimativa de tempo de processamento indicou ser este cálculo inviável.

Neste capítulo serão discutidas (secção III.1) as aproximações envolvidas nos cálculos computacionais, bem como os parâmetros de entrada dos programas. Em seguida, serão analisados os resultados obtidos para três regiões de massa distintas (secção III.2).

III.1. O PROCEDIMENTO

No último capítulo enfatizamos a necessidade de truncar nossa base de "shell-model". Este truncamento é sempre feito de maneira arbitrária, uma vez que não sabemos o quanto e em que limites nosso campo médio é realista. Nos cálculos microscópicos para a determinação dos parâmetros macroscópicos do Hamiltoniano de Bohr consideramos sempre duas camadas completas de oscilador harmônico, a de baixo contendo o nível de Fermi. Kumar e Baranger observaram que este procedimento levaria a raios nucleares superestimados, o que é uma evidência de que o truncamento da base não é por si só suficiente. Foi então introduzida uma atenuação dos níveis da camada de cima, essencialmente vazia, de modo que esta se amoldasse à camada de baixo, a qual no modelo passa a determinar o raio nuclear⁽¹⁴⁾.

Mas serão os níveis mais internos, não considerados no cálculo, realmente inertes? Podemos responder a esta questão apenas dentro do espírito dos cálculos realizados. O Hamiltoniano microscópico (II.1.4) contém parâmetros os quais regulam as intensidades das interações de quadrupolo-quadrupolo e emparelhamento, χ e G_{τ} respectivamente. Há várias estimativas para os dois parâmetros na literatura. Os resultados são bastante sensíveis a pequenas variações de ambos. Este modelo admite variar χ sem aumentar muito o tempo de processamento computacional, o mesmo não acontecendo com G_{τ} . Assim, para cada caroço escolhemos um valor para G_{τ} e ajustamos χ dentro de uma pequena variação em torno dos valores sugeridos por Kisslinger e Sorensen⁽²⁸⁾. A variação de χ somente não é capaz de reproduzir os dados experimentais, admitimos, então, uma renormalização dos parâmetros inerciais devida à contribuição dos níveis mais internos. Foi observado⁽⁸⁾, que neste contexto, esta contribuição não é desprezível.

A renormalização pode ser feita de duas formas⁽⁸⁾. A renormalização linear, em que temos pequenos desvios, é



introduzida por :

$$\begin{aligned} B_{\mu\nu}^{ren} &= B_{\mu\nu} + B_c \mathcal{L}_{\mu\nu} \\ J_k^{ren} &= J_k + 4B_c \beta^2 \mu m^2 \left(\gamma + \frac{2\pi K}{3} \right) \end{aligned} \quad (\text{III.1.1})$$

e a multiplicativa, no caso de contribuições maiores, por :

$$\begin{aligned} B_{\mu\nu}^{ren} &= F_i B_{\mu\nu} \\ J_k^{ren} &= F_i J_k \end{aligned} \quad (\text{III.1.2})$$

A grosso modo podemos dizer que \mathcal{X} regula a característica do espectro (através de variações de \mathcal{X} podemos ir do limite vibracional ao rotacional) e B_c ou F_i dão um fator de escala para os níveis.

Para efetuarmos o cálculo do caroço precisamos, então, entrar com os níveis de partícula e suas energias e com B_c ou F_i e \mathcal{X} . Devemos ressaltar que os últimos são os dois únicos parâmetros livres do caroço.

Tendo calculado as energias e funções de onda para um núcleo par-par, vamos resolver o problema do núcleo ímpar. Agora restringimos nossos níveis de partícula independente à camada em que se encontra o nível de Fermi (camada de oscilador harmônico mais nível de paridade intrusa), uma vez que os estados distantes em energia pouco contribuem.

No caso da diagonalização direta, o Hamiltoniano de acoplamento efetivo parte de um campo médio de oscilador harmônico. Já argumentamos que este não é o melhor campo médio a ser escolhido. Assim, para dar conta de eventuais desvios introduzimos dois parâmetros de ajuste na expressão (II.4.8), a qual fica :

$$T_{J\mu} = k_1 \delta_{J,2} \alpha_{2\mu} + k_2 y_J (\alpha_2 \alpha_2)_{J\mu} \quad (\text{III.1.3})$$

onde k_1 e k_2 são os únicos parâmetros de ajuste no caso dos isótopos ímpares.

No caso da diagonalização com projeção não são introduzidos parâmetros extras.

Em todos os cálculos $\hbar\omega$ será $41.2/A^{1/3} \text{ MeV}$.

III.2. OS RESULTADOS

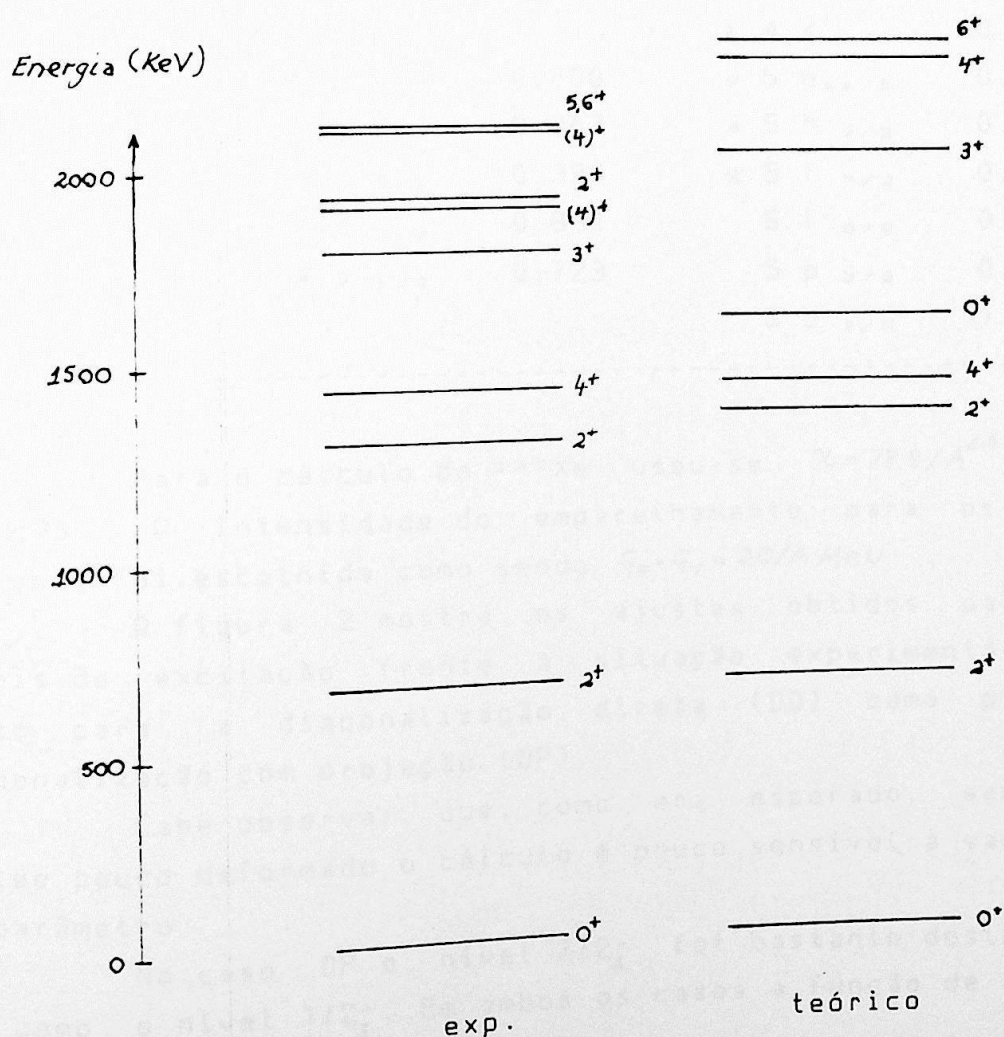
Analisamos o espectro de baixa energia de núcleos ímpares pertencentes a três regiões de massa distintas. Estudamos dois casos limites, um vibracional e outro rotacional, bem como um intermediário.

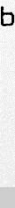
III.2.i O ^{133}Xe

Acoplando uma quasi-partícula a um caroço correspondente à solução de Kumar e Baranger do ^{132}Xe procuramos explicar o espectro de baixa energia do ^{133}Xe .

A figura 1 mostra a situação experimental e os resultados teóricos para o $^{133}\text{Xe}(\nu)$. O espectro experimental sugere um comportamento coletivo vibracional com pequenas

Figura 1. Níveis de excitação do ^{133}Xe





anarmonicidades. O espectro teórico corrobora tal hipótese, inclusive prevendo um estado 0^+ não observado compondo o tripleto de 2 fonons.

A tabela 1 fornece os níveis de partícula⁽⁴²⁾ que entram no cálculo do ^{132}Xe em unidades de $41.2/A^{4/3}$ MeV. Os níveis de neutrons que entram no cálculo do ^{133}Xe são tirados da mesma tabela e estão assinalados com um asterisco.

Tabela 1. Níveis de energia de partícula para ^{132}Xe e ^{133}Xe

Níveis de partícula	protons		neutrons	
	N l j	energia	N l j	energia
	3 f $7/2$	-0.681	4 g $7/2$	-0.778
	3 f $5/2$	-0.298	* 4 g $7/2$	-0.222
	3 p $3/2$	-0.315	* 4 d $5/2$	-0.304
	3 p $1/2$	-0.142	* 4 d $3/2$	0.021
			* 4 s $1/2$	-0.152
	4 g $7/2$	0.000	* 5 h $11/2$	0.000
	4 g $7/2$	0.387	* 5 h $9/2$	0.623
	4 d $5/2$	0.390	* 5 f $7/2$	0.652
	4 d $3/2$	0.691	5 f $5/2$	0.949
	4 s $1/2$	0.723	5 p $3/2$	0.871
			5 p $1/2$	1.021

Para o cálculo do ^{132}Xe usou-se $\chi = 78.8/A^{1.4}$ MeV e $F_i = 1.23$. A intensidade do emparelhamento para os dois isótopos foi escolhida como sendo $G_x - G_y = 20/A$ MeV.

A figura 2 mostra os ajustes obtidos para os níveis de excitação frente à situação experimental⁽⁴³⁾, tanto para a diagonalização direta (DD) como para a diagonalização com projeção (DP).

Cabe observar que, como era esperado, sendo o núcleo pouco deformado o cálculo é pouco sensível à variação do parâmetro.

No caso DP o nível $7/2_1^-$ foi bastante deslocado, bem como o nível $1/2_1^+$. Em ambos os casos a função de onda é

fortemente influenciada pelo estado 2_1^+ do caroço, indicando que tanto nossa intensidade de interação no acoplamento pode ser muito forte, como a função de onda de 2_1^+ pode ser excessivamente deformada. A segunda hipótese é praticamente descartada observando-se a distribuição das amplitudes de 2_1^+ em β, γ (8). Ou seja, a intensidade de interação de acoplamento não deve ser bem representada pelo potencial de campo médio adotado. Esta última afirmação é confirmada pelo valor de K_1 que necessitamos para o ajuste dos níveis no cálculo DD, uma vez que incluindo uma ordem a mais ($K_2 \neq 0$) o valor de K_1 se afasta de 1, valor fornecido pelo modelo no caso de um potencial de campo médio de oscilador harmônico (seção II.4.).

III.2.ii. O ^{183}W

Acoplando uma quasi-partícula a um caroço correspondente à solução de Kumar e Baranger do ^{184}W procuramos explicar o espectro de baixa energia do ^{183}W .

O ^{183}W já foi objeto de vários estudos teóricos (13-25) sendo bem explicado no contexto rotacional. Usando o ^{183}W como exemplo, Kerman (45) mostrou como explicar as transições inter-banda usando o acoplamento de Coriolis em um cálculo perturbativo. Este isótopo apresenta, também, muitas informações experimentais (46). Por este motivo, presta-se muito bem para uma análise da qualidade do modelo.

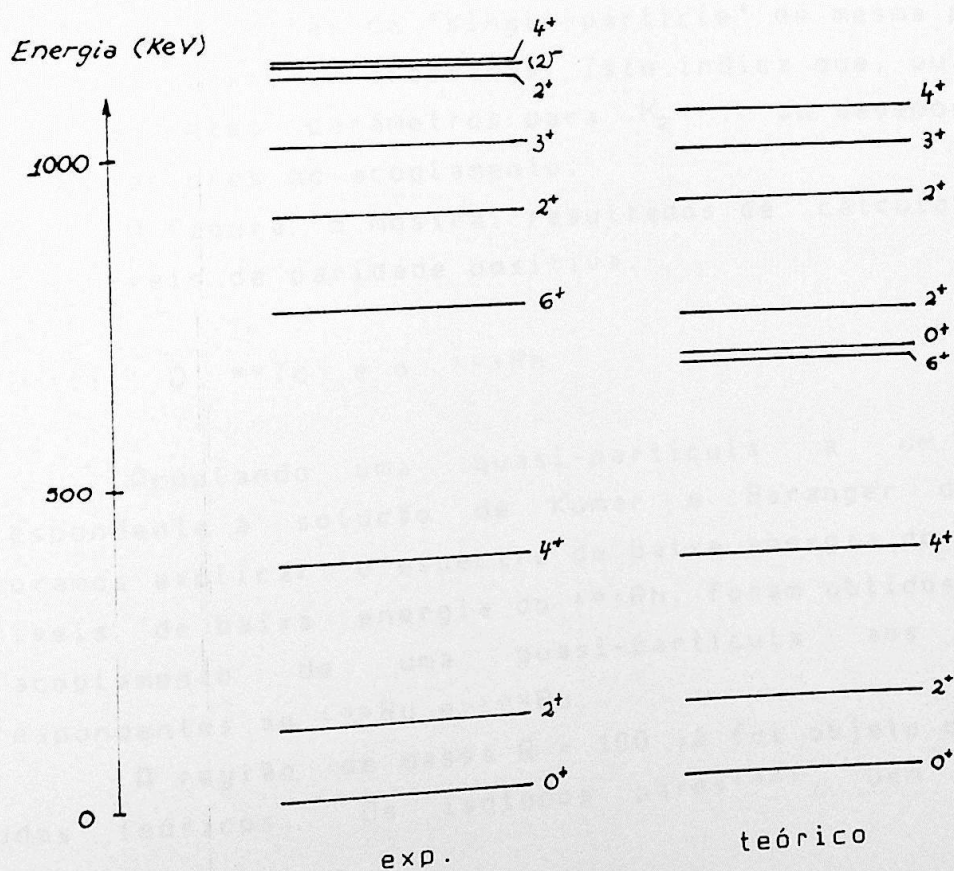
A tabela 2 fornece os níveis de partícula (42) em unidades de $41.2/A^{4/3}$ MeV que entram no cálculo do ^{184}W . Os níveis de neutrons para o ^{183}W estão assinalados com asterisco.

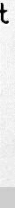
Para o cálculo do ^{184}W usou-se $\chi = 73/A^{1.4}$ MeV e uma renormalização linear $B_c = 10^{-5} A^{7/3}$. As intensidades de emparelhamento para os dois isótopos (^{183}W e ^{184}W) foram escolhidas como sendo $G_\pi = 27/A$ e $G_\nu = 22/A$ (MeV). A figura 3 mostra a situação experimental (44) em comparação com o resultado teórico para o ^{184}W (8).



Tabela 2. Níveis de energia de partícula para ^{184}W e ^{183}W

Níveis de partícula	protons			neutrons				
	N	l	j	energia	N	l	j	energia
	4	g	$9/2$	-1.043	5	$h_{11/2}$		-1.165
	4	g	$7/2$	-0.580	* 5	$h_{9/2}$		-0.513
	4	d	$5/2$	-0.333	* 5	$f_{7/2}$		-0.438
	4	d	$3/2$	-0.069	* 5	$f_{5/2}$		-0.108
	4	s	$1/2$	0.000	* 5	$p_{3/2}$		-0.129
					* 3	$p_{1/2}$		0.000
	5	$h_{11/2}$		-0.235	* 6	$i_{13/2}$		0.172
	5	$h_{9/2}$		0.502		$i_{11/2}$		0.615
	5	$f_{7/2}$		0.624	* 6	$g_{9/2}$		0.510
	5	$f_{5/2}$		0.970		$g_{7/2}$		0.944
	5	$p_{3/2}$		0.995		$d_{5/2}$		0.778
	5	$p_{1/2}$		1.145		$d_{3/2}$		0.953
						$s_{1/2}$		0.864

Figura 3. Níveis de excitação do ^{184}W 



A figura 4 mostra ajustes para os níveis de energia do ^{183}W para diversas situações.

O procedimento adotado para os ajustes foi : dado um valor para K_2 procuramos o valor de K_1 que reproduzisse a banda $1/2^-$. Fizemos várias tentativas sem alterar as energias de partícula, o primeiro ajuste mostra um espectro obtido desta forma. Alterando a energia do nível $d_{5/2}$ conseguimos reproduzir algo mais que a banda fundamental. Muito embora os espaçamentos em cada banda estejam corretos, as cabeças de banda estão mal posicionadas. Examinamos, então, as velocidades de transição para cada ajuste. Assim, pudemos observar que o termo de segunda ordem em K_2 é importante. A tabela 3 mostra que as velocidades de transição para o ajuste (d) são boas, mesmo para níveis da banda $3/2^-$.

Em nenhum cálculo com DD conseguimos reproduzir a ordem dos níveis de paridade positiva (órbita $i_{1,3/2}$ de partícula de paridade intrusa). As tentativas de ajuste varreram K_1 de 0.0 a 2.0 e consideraram $K_2 = 0.0$, $K_2 = 1.0$ e $K_2 = 2.0$.

Estes níveis são bastante significativos para a análise do modelo, pois o espectro é relativamente insensível às energias de partícula independente, uma vez que as demais órbitas de "single-particle" de mesma paridade estão energeticamente afastadas. Isto indica que, ou devemos tentar diferentes parâmetros para K_2 , ou devemos ir a ordens superiores no acoplamento.

A figura 5 mostra resultados de cálculos com DP para os níveis de paridade positiva.

III.2.iii. O ^{99}Tc e o ^{101}Rh

Acoplando uma quasi-partícula a um caroço correspondente à solução de Kumar e Baranger do ^{100}Ru procuramos explicar o espectro de baixa energia do ^{99}Tc . Já os níveis de baixa energia do ^{101}Rh , foram obtidos através do acoplamento de uma quasi-partícula aos caroços correspondentes ao ^{100}Ru e ^{102}Ru .

A região de massa $A = 100$ já foi objeto de vários estudos teóricos. Os isótopos pares⁽⁴⁴⁾, bem como os

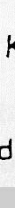
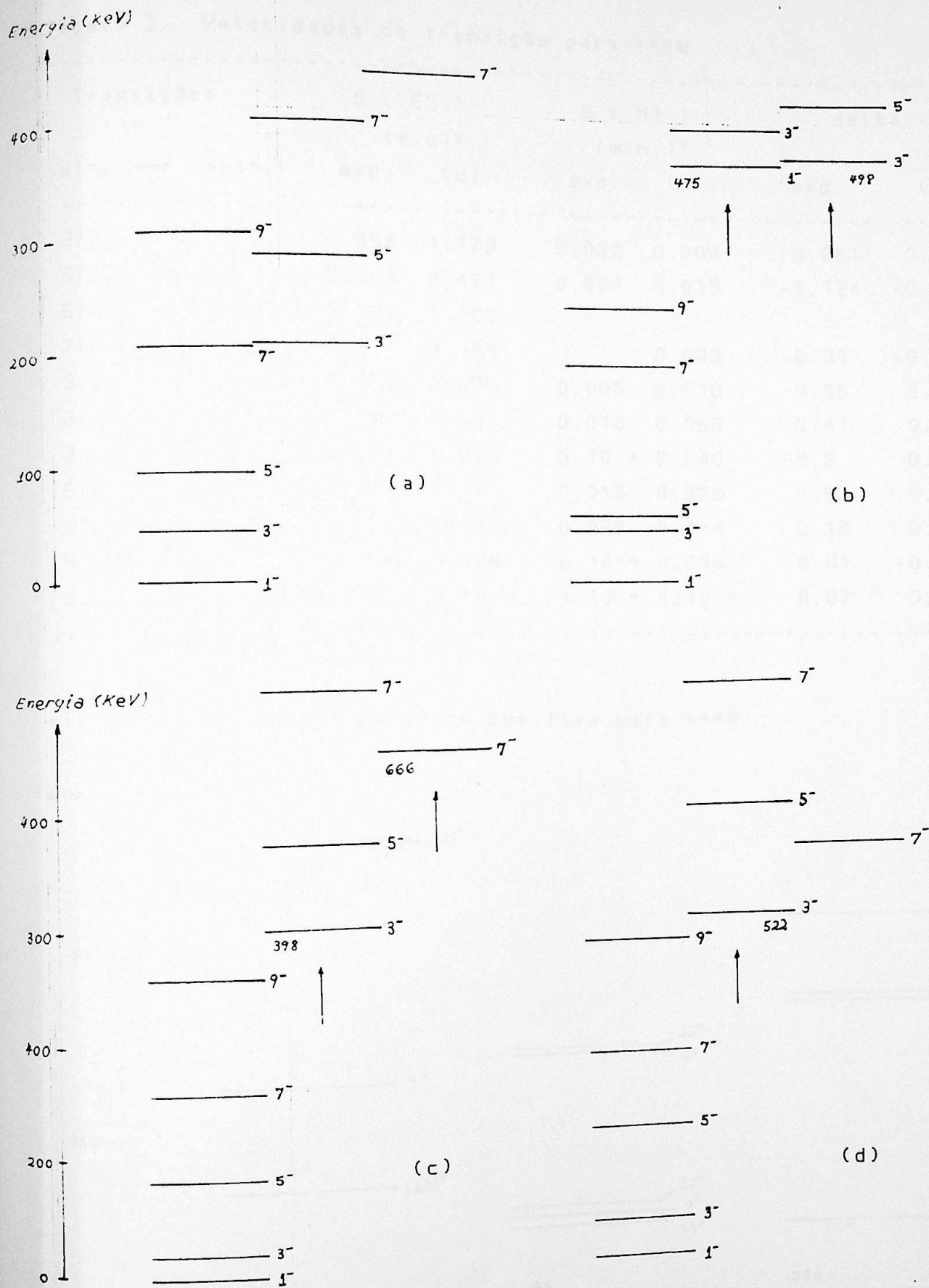


Figura 4. Níveis de paridade negativa para o ^{183}W

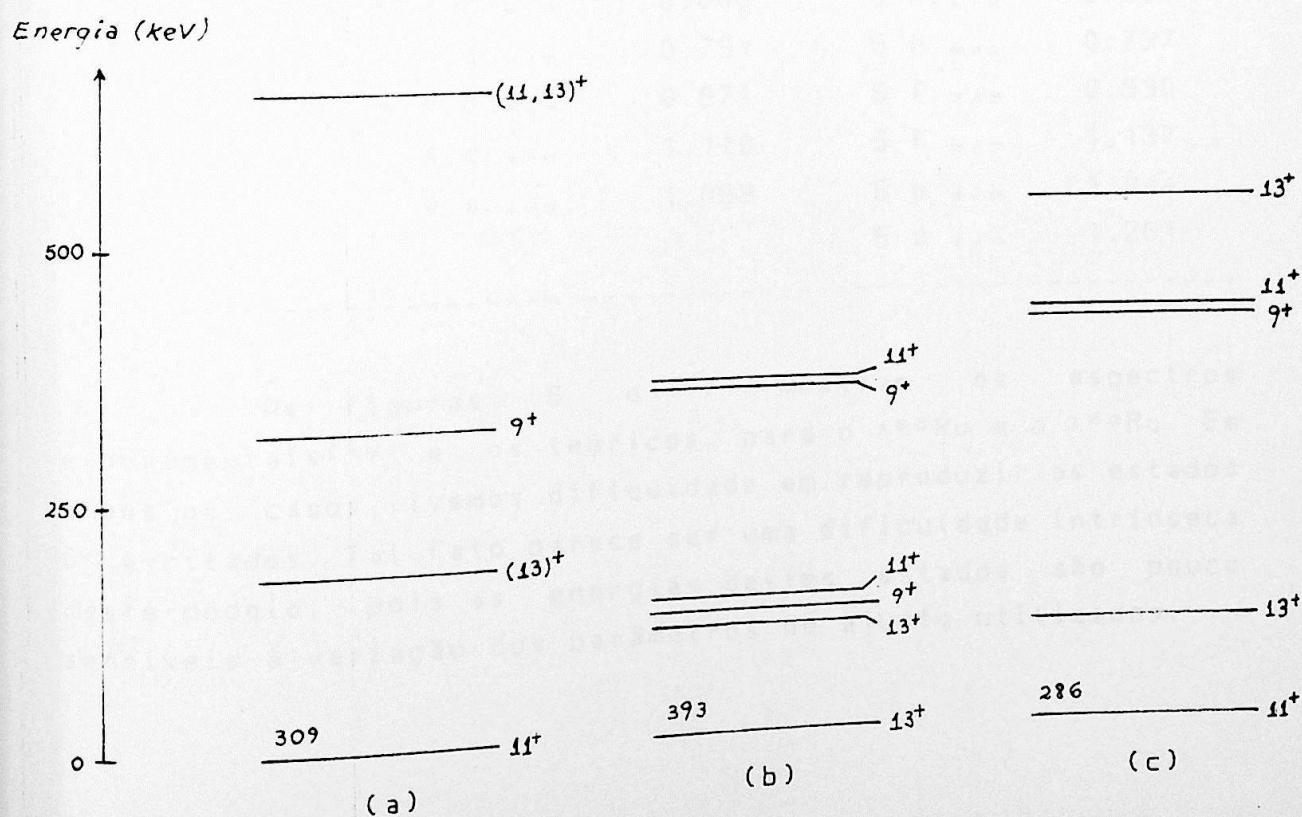


Legenda: (a) experimental; (b) DD com $K_1 = 0.15$ e $K_2 = 0$; (c) DD com $K_1 = 0.25$ e $K_2 = 0$ (nível $d_{5/2}$ levantado de 0.5 MeV); (d) DD com $K_1 = 0.50$ e $K_2 = 1.0$ (idem para $d_{5/2}$). As setas indicam que a cabeça de banda não está na escala.



Tabela 3. Velocidades de transição para ^{183}W

Transições		B (E2)		B (M1)		delta	
		(e.b.) ²		(m.n.) ²			
spin _i	→ spin _f	exp.	(d)	exp.	(d)	exp.	(d)
$3/2_1^-$	$1/2_1^-$	0.958	1.173	0.022	0.004	-0.081	-0.165
$5/2_1^-$	$3/2_1^-$	0.208	0.421	0.003	0.019	-0.124	-0.080
$5/2_1^-$	$1/2_1^-$	0.700	1.702				
$7/2_1^-$	$5/2_1^-$		0.181		0.003	-0.31	-0.198
$3/2_2^-$	$5/2_1^-$	0.013	0.035	0.005	0.018	0.15	0.173
$3/2_2^-$	$3/2_1^-$	0.101	0.591	0.010	0.063	0.41	-0.426
$3/2_2^-$	$1/2_1^-$	0.121	0.005	$5 \cdot 10^{-4}$	0.040	-0.5	0.258
$5/2_2^-$	$3/2_2^-$	1.323	2.171	0.015	0.029	0.63	0.231
$5/2_2^-$	$7/2_1^-$	0.441	0.036	0.065	0.044	0.18	0.110
$5/2_2^-$	$5/2_1^-$	0.048	0.028	$8 \cdot 10^{-4}$	0.038	0.91	-0.167
$7/2_3^-$	$9/2_1^-$	$6 \cdot 10^{-6}$	$3 \cdot 10^{-6}$	$1 \cdot 10^{-4}$	$1 \cdot 10^{-4}$	0.07	0.001

Figura 5. Níveis de paridade positiva para ^{183}W 

Legenda : (a) experimental; (b) DD com $k_1 = 0.50$ e $k_2 = 1.0$
(nível $d_{3/2}$ levantado de 0.5 MeV); (c) DP

ímpares⁽⁴⁷⁻⁴⁸⁾, desta região de massa foram estudados tanto no limite rotacional como no limite vibracional.

A tabela 1 fornece as energias dos níveis de partícula⁽⁵⁰⁾ que entram no cálculo do núcleo desta região em unidades de $41.2/A^{1/3}$ MeV. Os níveis de próton que entram no cálculo do núcleo ímpar estão assinalados com asterisco. Para o cálculo do ^{100}Ru usamos $79.6/A^{1.4}$ MeV e $F_i = 1.45$; no cálculo do ^{102}Ru utilizamos $81.7/A^{1.4}$ MeV e $F_i = 1.48$. Para todos os isótopos foi escolhida a intensidade de emparelhamento como sendo $G_\pi = G_\nu = 20/A$ MeV.

Tabela 4. Níveis de energia de partícula independente para ^{100}Ru , ^{102}Ru , ^{99}Tc e ^{101}Rh

Níveis de partícula	prótons		nêutrons	
	N l j	energia	N l j	energia
*	3 f $7/2$	-0.566	4 g $9/2$	-1.014
*	3 f $5/2$	-0.232	4 g $7/2$	-0.157
*	3 p $3/2$	-0.366	4 d $5/2$	-0.287
*	3 p $1/2$	-0.223	4 d $3/2$	0.188
			4 s $1/2$	0.133
+	4 g $9/2$	0.000	5 h $11/2$	0.000
*	4 g $7/2$	0.791	5 h $9/2$	0.797
*	4 d $5/2$	0.671	5 f $7/2$	0.630
	4 d $3/2$	1.110	5 f $5/2$	1.137
	4 s $1/2$	1.059	5 p $3/2$	1.044
			5 p $1/2$	1.261

As figuras 6 e 7 mostram os espectros experimentais⁽⁴⁴⁾ e os teóricos para o ^{100}Ru e o ^{102}Ru . Em ambos os casos tivemos dificuldade em reproduzir os estados 0^+ excitados. Tal fato parece ser uma dificuldade intrínseca deste modelo, pois as energias destes estados são pouco sensíveis à variação dos parâmetros de ajuste utilizados.

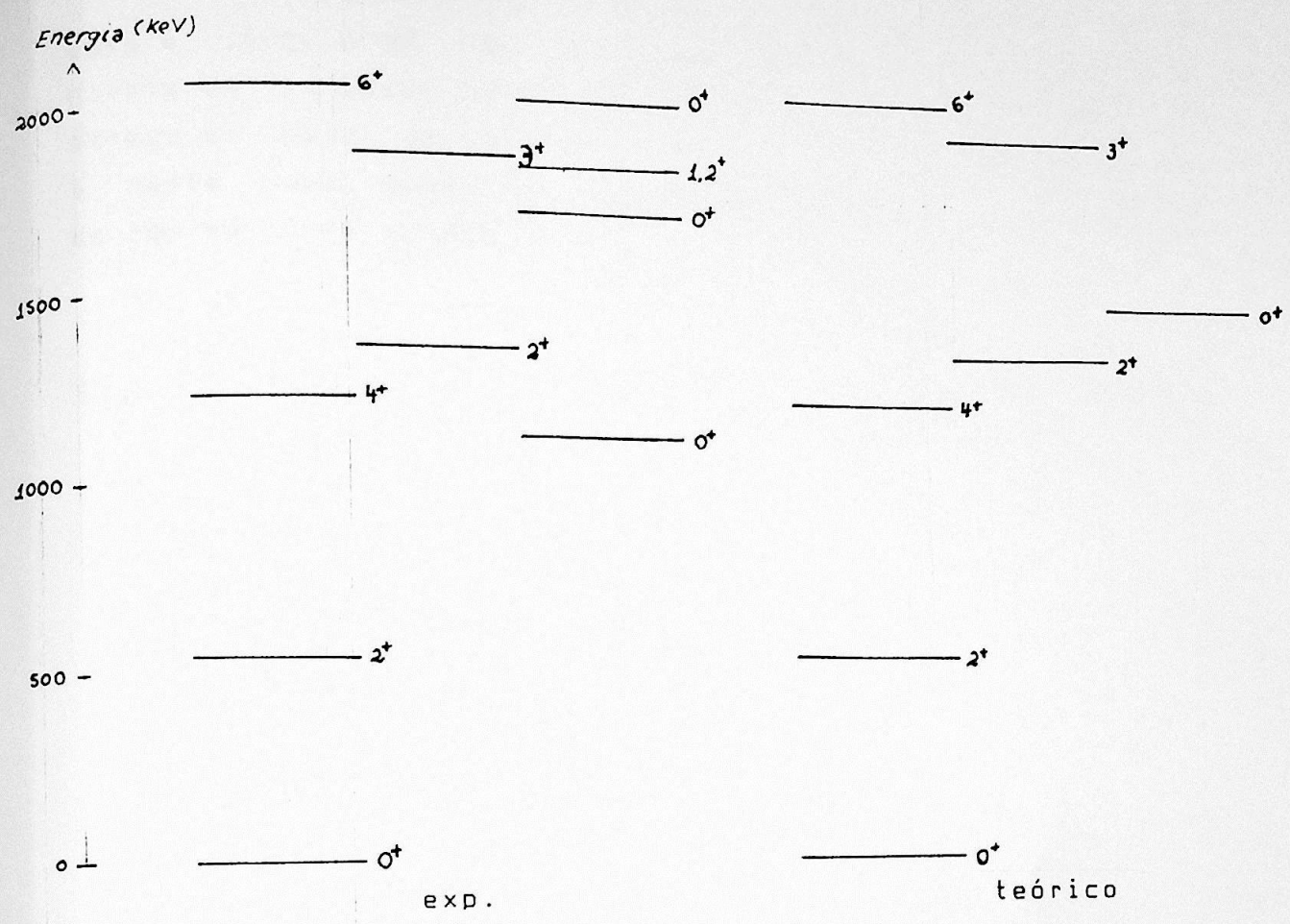
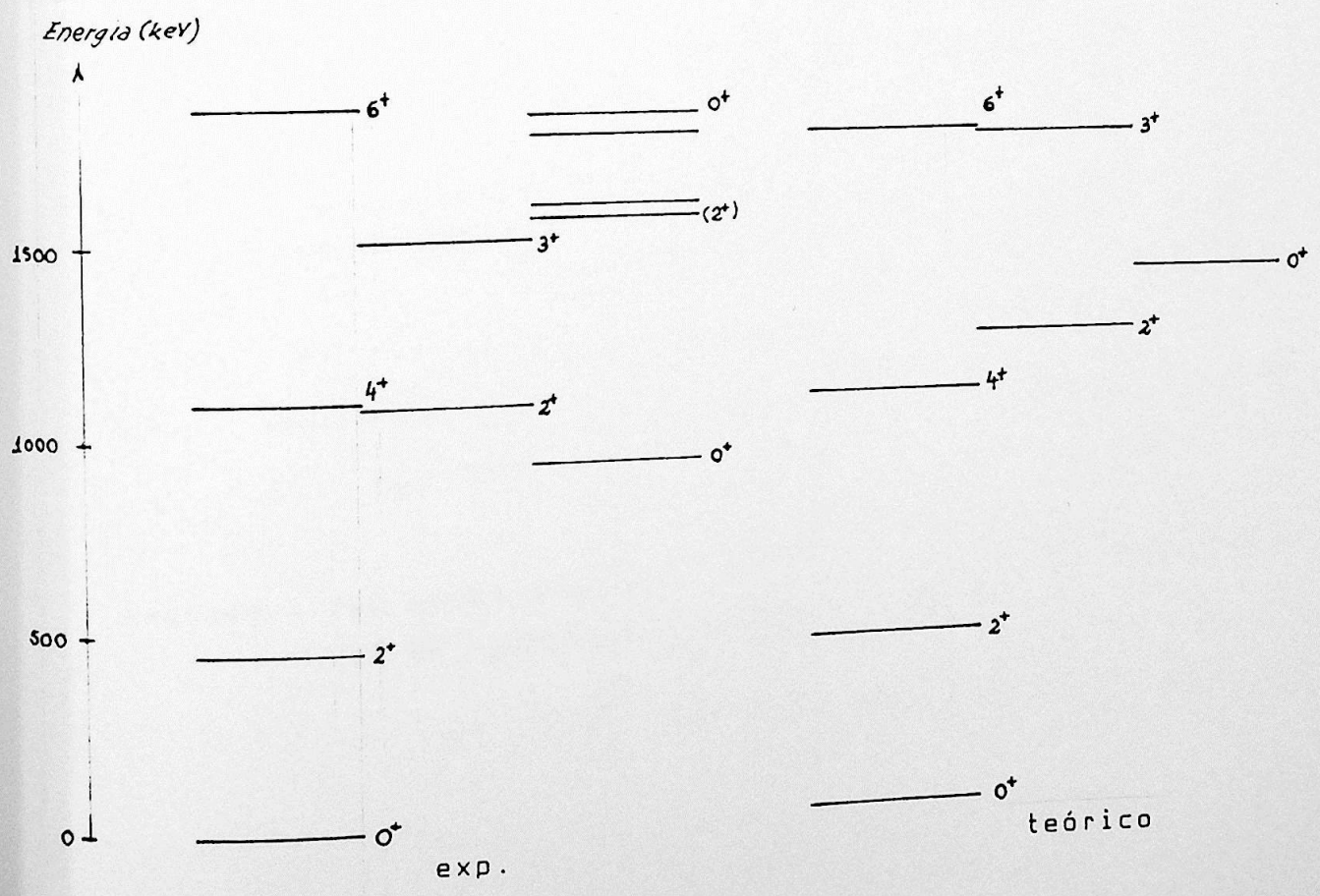
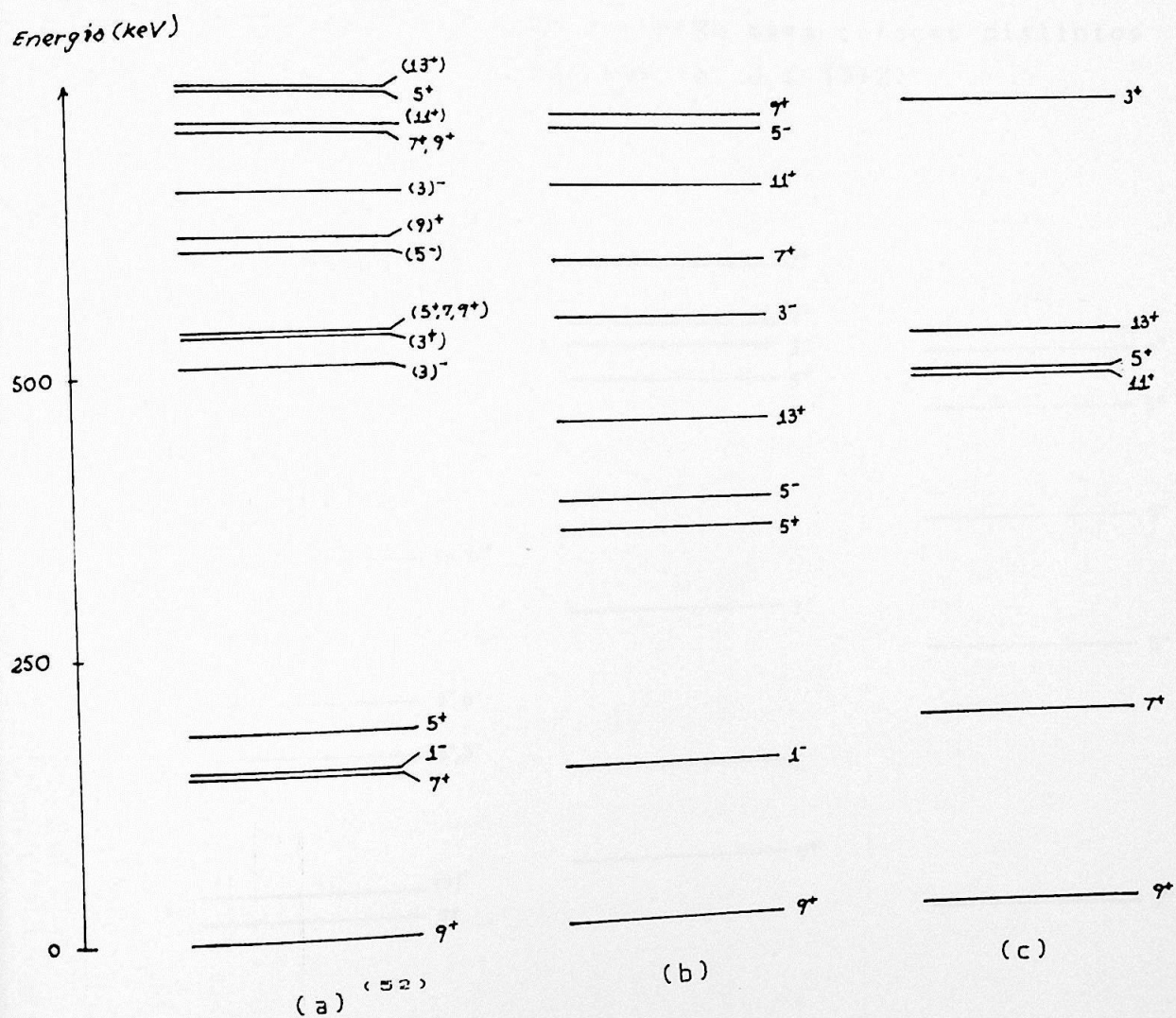


Figura 7. Níveis de excitação do ^{102}Ru



A figura 8 mostra os resultados para o ^{99}Tc . Neste caso o cálculo DD não consegue reproduzir os primeiros caroço ao nível de paridade intrusa $h_{9/2}$. O cálculo DP não é, neste caso, quantitativamente melhor do que o DD, apesar de reproduzir o estado $7/2^+$.

Figura 8. Níveis de excitação do ^{99}Tc para diversos ajustes ($E < 900$ keV e $J \leq 13/2$)

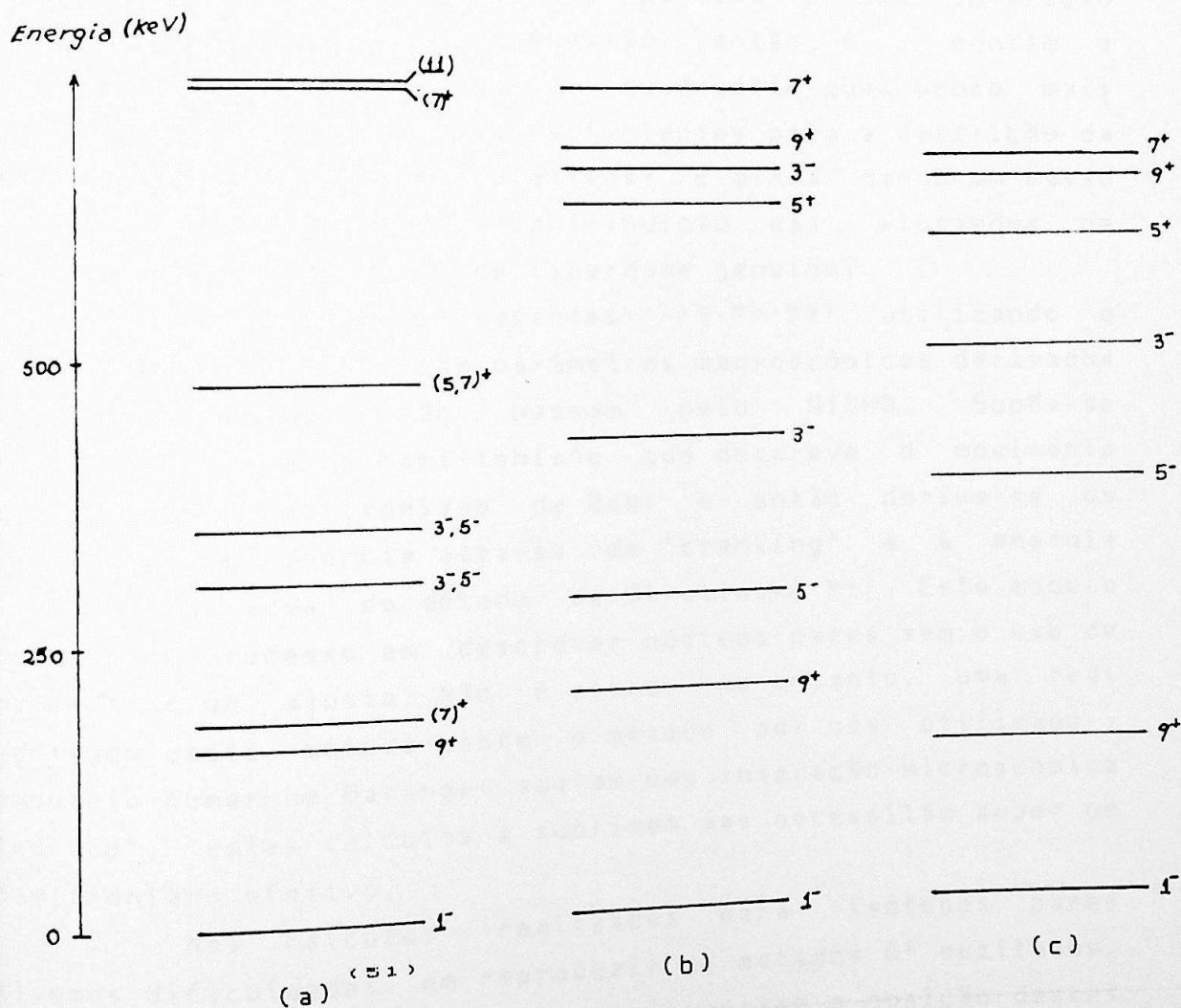


Legenda : (a) experimental ; (b) DD com $K_1 = 0.65$ e $K_2 = 0$;
(c) DP (somente paridade positiva)

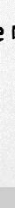


A figura 9 mostra os resultados para o ^{101}Rh . Foram considerados os caroços correspondentes ao ^{100}Ru e ao ^{102}Ru . Tais cálculos, usando DD, não nos levaram a resultados substancialmente diferentes. Este resultado não deve ser interpretado como uma validação do método por si. O fato de que dois caroços vizinhos dão resultados semelhantes para o cálculo do acoplamento é uma decorrência apenas de que eles apresentam uma transição suave. O modo como a partícula extra polariza o caroço não podemos descrever, pois supusemos (II.2.12).

Figura 9. Níveis de excitação do ^{101}Rh para caroços distintos ($E < 800 \text{ keV}$ e $J \leq 13/2$)



Legenda : (a) experimental ; (b) DD com $K_1 = 0.90$ e $K_2 = 0$, caroço ^{100}Ru ; (c) DD com $K_1 = 0.70$ e $K_2 = 0$, caroço ^{102}Ru



IV. CONCLUSÕES

A natureza não só é mais complexa do que pensamos,
como é mais complexa do que podemos imaginar.
(W. Heisenberg)

O Hamiltoniano de Bohr, embora restrinja as coordenadas coletivas a β , γ e Ω , ainda é um meio poderoso para descrevermos movimentos coletivos. O tratamento de núcleos ímpares acoplado a uma quasi-partícula a um caroco coletivo pode ser, em princípio, um modo eficiente de explicar o espectro de baixa energia dos mesmos.

Como nosso ponto de partida é uma interação residual de dois corpos a questão, então, é: contém o Hamiltoniano microscópico de quadrupolo-quadrupolo mais emparelhamento ingredientes suficientes para a descrição da dinâmica dos movimentos coletivos? E ainda, dando um passo adiante, qual será a contribuição das vibrações de emparelhamento como grau de liberdade genuíno?

Cálculos mais recentes^(7,15,20,23) utilizando o Hamiltoniano de Bohr, com parâmetros macroscópicos derivados microscopicamente, não passam pelo ATDHB. Supõe-se simplesmente que o Hamiltoniano que descreve o movimento coletivo é o Hamiltoniano de Bohr e então deriva-se os parâmetros de inércia através de "cranking" e a energia potencial através do método de Strutinski⁽²⁴⁾. Este modelo tem obtido sucesso em descrever núcleos pares sem o uso de parâmetros de ajuste. Não é clara, no entanto, uma real vantagem deste método sobre o método por nós utilizado: enquanto Kumar e Baranger adotam uma interação microscópica "ad hoc", estes cálculos a suprimem mas necessitam supor um Hamiltoniano efetivo.

Nos cálculos realizados para isótopos pares tivemos dificuldades em reproduzir os estados 0^+ excitados. Os parâmetros χ e F_i pouco influenciam a posição destes níveis. Não devemos nos olvidar do fato de que nosso modelo descreve comportamentos puramente coletivos e que estes

estados podem ser fortemente influenciados por graus de liberdade de partícula. As vibrações de emparelhamento também devem influenciar estes níveis. Cálculos envolvendo este grau de liberdade em uma teoria adiabática só foram efetuados para uma interação residual que continha apenas o termo de emparelhamento puro em um modelo de dois níveis⁽²²⁾, sendo sua aplicação para um caso mais geral bastante complexa.

No cálculo para os núcleos ímpares o modelo foi capaz de explicar os níveis de excitação tanto em um limite rotacional, como em um limite vibracional.

Tais cálculos dependem, em grande parte, das energias dos níveis de partícula independente. De fato, vimos que os cálculos através da diagonalização direta são bastante sensíveis às variações de energias de "single-particle". Devemos, então, concentrar nossa atenção inicialmente nos níveis oriundos do estado de partícula de paridade intrusa para validar o modelo. A diagonalização direta nem sempre (¹⁸³W) foi capaz de reproduzir a ordem correta destes níveis, enquanto que a diagonalização com projeção comprimiu demais os mesmos. Esta é uma indicação de que talvez a intensidade da interação de acoplamento seja superestimada, ou mesmo de que é necessário introduzir uma interação de acoplamento mais realista.

O sucesso dos cálculos através da diagonalização com projeção está no fato de que estes foram realizados sem nenhum parâmetro de ajuste, comprovando a visão de uma teoria unificada para o movimento nuclear.

O modelo padece, entretanto, das mesmas limitações do tratamento envolvendo o núcleo par. As variáveis coletivas são as mesmas e o tratamento não considera graus de liberdade envolvendo mais partículas desemparelhadas. Estes são ingredientes certamente importantes para a compreensão dos níveis de excitação dos isótopos ímpares. Acreditamos, porém, que a idéia do acoplamento de uma quasi-partícula ao caroço de Bohr ainda não foi completamente explorada, assim como o poder deste modelo não foi ainda esgotado.

APÊNDICES

A. Convenções

Neste trabalho usaremos a convenção de Edmonds⁽³⁴⁾ para o teorema de Wigner-Eckart :

$$\langle \alpha I M | T_{\lambda \mu} | \alpha' I' M' \rangle = (-)^{I-M} \begin{pmatrix} I & \lambda & I' \\ -M & \mu & M' \end{pmatrix} \langle \alpha I || T_{\lambda} || \alpha' I' \rangle \quad (\text{A.1})$$

Para os coeficientes de acoplamento 3-j, Clebsch-Gordan e Racah as fases são as de Condon e Shortley, convenção que leva aos mesmos resultados que a de Racah e largamente utilizada⁽³⁷⁾.

Os produtos entre tensores esféricos T e T' ao longo do trabalho tem uma notação sintética :

$$[T_a \times T'_b]_{c\gamma} = (T_a T'_b)_{c\gamma} = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha\alpha\beta\beta | c\gamma \rangle T_{a\alpha} T'_{b\beta} \quad (\text{A.2})$$

Em especial, o produto escalar toma a forma :

$$T_a \cdot T'_b = \sum_{\gamma} (-)^{\gamma} T_{a\gamma} T'_{b-\gamma} \delta_{ab} = (-)^a \delta_{ab} \sqrt{2a+1} [T_a \times T'_b]_{00} \quad (\text{A.3})$$

Para a matriz de rotação de Wigner utilizamos a convenção de Edmonds⁽³⁴⁾, a qual se relaciona à de Brink e Satchler⁽³⁷⁾ e à de Ring e Schuck⁽²¹⁾ da forma :

$$[D_{MK}^I(\Omega)]_E = [D_{MK}^I(\Omega)]_{BS}^* = [D_{MK}^I(\Omega)]_{RS}^* \quad (\text{A.4})$$

esta diferença está associada ao fato de que nossa transformação gera rotações ativas⁽⁴⁾.

Dada nossa função de onda de partícula independente (II.1.2) a ação do operador de reversão temporal⁽⁴⁰⁾ é dada por :

$$\mathcal{T} |N(jm)\rangle = |N(j\bar{m})\rangle = (-)^{j-m} |N(j-m)\rangle \quad (\text{A.5})$$

B. A Função de Onda Microscópica

A função de onda microscópica em termos das coordenadas coletivas é obtida a partir da solução do Hamiltoniano :

$$H = \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k - M\omega^2 \sum_\mu \alpha_\mu^* r^2 Y_{2\mu} - G \sum_{\mu\nu>0} c_\mu^\dagger c_\mu^\dagger c_\nu^\dagger c_\nu \quad (\text{B.1})$$

onde ϵ_k são os autovalores do Hamiltoniano de campo médio representado pela equação (II.1.3) e α_μ são os tensores que descrevem a superfície nuclear (II.4.1)

A interação de quadrupolo-quadrupolo no sistema intrínseco pode ser escrita como :

$$H_{q-q} = -M\omega^2 r^2 \left[\beta \cos\delta Y_{20} + \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin\delta (Y_{2-2} + Y_{22}) \right] \quad (\text{B.2})$$

a qual pode ser diagonalizada facilmente na base descrita pela equação (II.1.2), resultando nos estados de partícula, funções de β e δ :

$$a_i^\dagger = \sum_{Nlj\Omega} W_{Nlj\Omega}^i c_{Nlj\Omega}^\dagger \quad (\text{B.3})$$

onde a_i^\dagger é o operador de criação de partícula no estado i ; $c_{Nlj\Omega}^\dagger$ são os operadores de criação de estados esféricos de partícula independente; $W_{Nlj\Omega}^i$ são os coeficientes da expansão; Ω é a projecção de j no eixo "3" do referencial intrínseco. Estes estados retêm dos estados esféricos apenas o número quântico de "signature" $\langle \pi \rangle$, o que vem do fato de que a interação (B.2) não mistura estados de $\Omega = \Omega' \pm 1$, de modo que a somatória é quebrada em duas. Denominaremos de direto o estado em que $(-)^{\Omega-1/2} = 1$. O estado direto revertido temporalmente completa o conjunto (Apêndice A).

Resolvemos o problema de emparelhamento dentro da aproximação de BCS usual. Tornamos o problema de dois corpos um problema de um corpo através da transformação de Bogolyubov-Valatin

$$\alpha_\mu = u_\mu a_\mu^\dagger - v_\mu a_{\bar{\mu}} \quad (\text{B.4})$$



a qual para preservar as relações de anticomutação de fermions requer a normalização :

$$u_{\mu}^2 + v_{\mu}^2 = 1 \quad (\text{B.5})$$

O problema será resolvido variacionalmente. Lembrando que a transformação feita não conserva o número de partículas, introduzimos um multiplicador de Lagrange (λ) para assegurar que o operador contagem de partículas agindo no vácuo de BCS

$$\langle - | \hat{N} | - \rangle = N \quad (\text{B.6})$$

forneça como valor esperado o número correto de partículas.

Assim, fazendo

$$H' = H - \lambda \hat{N} \quad (\text{B.7})$$

$$H' = \sum_{\nu > 0} (\epsilon_{\nu}^0 - \lambda) (a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} + a_{\bar{\nu}}^{\dagger} a_{\bar{\nu}}) - G \sum_{\mu \nu} a_{\mu}^{\dagger} a_{\bar{\mu}}^{\dagger} a_{\bar{\nu}} a_{\nu} \quad (\text{B.8})$$

a condição variacional é dada por

$$\frac{\partial}{\partial \lambda} \langle - | H' | - \rangle = 0 \quad (\text{B.9})$$

a qual nos leva às equações de BCS

$$\frac{G}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{1}{[(\epsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}} = 1 \quad (\text{B.10})$$

$$\sum_{\nu > 0} \left\{ 1 - \frac{\epsilon_{\nu} - \lambda}{[(\epsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}}} \right\} = N \quad (\text{B.11})$$

onde o "gap" é dado por

$$\Delta = G \sum_{\nu > 0} u_{\nu} v_{\nu} \quad (\text{B.12})$$

$$(\text{B.13})$$

e

$$\epsilon_{\nu} = \epsilon_{\nu}^0 - G v_{\nu}^2$$

A energia de quasi-partícula é dada por

$$e_{\nu} = [(\epsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{B.14})$$



Esta solução não conserva o número de partículas. Existem métodos projetivos⁽²⁹⁾ os quais dão tratamentos mais exatos ao problema. No entanto, os resultados destes métodos não diferem muito dos da solução aqui apresentada para cálculos envolvendo senioridade 0⁽³⁰⁾, sendo esta a condição importante para a validade dos nossos cálculos segundo os argumentos da secção II.2.

O número de estados que entram no cálculo da função de onda microscópica do Hamiltoniano de quadrupolo-quadrupolo mais emparelhamento é sempre escolhido arbitrariamente. Há, no entanto, um compromisso de que o campo médio fenomenológico escolhido seja preservado.

Considerando que o termo quadrupolar tem um alcance longo e que nosso campo médio é infinitamente líquido, devemos impor um limite superior aos estados de partícula que compõe a base. Como estamos interessados em uma descrição macroscópica coletiva, a base de partícula será truncada em um limite inferior por conveniência de cálculo, uma vez que os níveis muito internos não devem influenciar a superfície nuclear. Esta última afirmação é de início baseada no modelo de Rowe⁽²⁵⁾ de dois fluidos, porém é uma consequência da fórmula de "cranking"⁽⁴¹⁾ também.

Considerando o termo de emparelhamento estados muito internos terão pouca influência no cálculo devido ao alto fator de ocupação e consequente inibição pelo Princípio de Pauli. Estados de energia muito alta devido ao pequeno fator de ocupação também terão pouca influência.

C. Operador Macroscópico x Microscópico

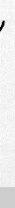
Estudando os núcleos ímpares, não é trivial separarmos a partir de um operador microscópico para as transições eletromagnéticas a parte coletiva da parte de quasi-partícula sem um tratamento do tipo "blocking". Usamos, então, em nossos cálculos o operador macroscópico apropriado (função das coordenadas β e γ) para o caroço.

A tabela C.1. faz uma comparação entre os resultados de $B(E2)$ partindo do operador microscópico^(a) e

do operador macroscópico (II.7.2) para o ^{132}Xe . Tal comparação, mostrando a equivalência dos resultados, é apenas um teste de qualidade do modelo para núcleos pares, pois se acreditamos que um conjunto de coordenadas coletivas é apropriado para descrever o Hamiltoniano devemos crer que o mesmo é apropriado para descrever os operadores de transição.

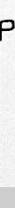
Tabela C.1. Comparação de $B(E2)$ no ^{132}Xe para operadores de naturezas diferentes

transição		$B(E2)_{\text{micro}}$	$B(E2)_{\text{macro}}$
spin_i	spin_f	(e.barn) ²	(e.barn) ²
2_1	0_1	0.087	0.100
2_2	2_1	0.147	0.176
2_3	0_1	0.001	0.001
4_1	2_1	0.153	0.183
6_1	4_1	0.206	0.255



REFERENCIAS

1. A.Bohr, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 26 nº14 (1952)
2. D.R.Bès, Nucl. Phys. 10 (1959) 373
3. A.S.Davydov, Nucl. Phys. 24 (1961) 682
4. K.Kumar e M.Baranger, Nucl. Phys. A92 (1967) 608
5. G.Gneuss e W.Greiner, Nucl. Phys. A171 (1971) 449
6. S.G.Rohoziński et al., Nucl. Phys. A292 (1977) 66
7. Th.J.Köppel, Tese de Doutorado, Universidade de Basel (1980)
8. M.T.F.da Cruz, Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo (1987)
9. A.Bohr e B.R.Mottelson, Nuclear Structure, vol.I, W.A.Benjamin (1969) e vol.II, W.A.Benjamin (1975)
10. A.Bohr e B.R.Mottelson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 27 nº16 (1953)
11. A.de-Shalit, Phys. Rev. 122 (1961) 1530
12. F.S.Stephens et al., Phys. Rev. Lett. 29 (1972) 438
13. F.S.Stephens, Rev. Mod. Phys. 47 (1975) 43
14. A.S.Davydov e G.F.Filippov, Nucl. Phys. 8 (1958) 237
15. Th.J.Köppel et al., Nucl. Phys. A403 (1983) 263
16. M.Trefz et al., Z.Phys. A312 (1983) 195
17. S.G.Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 29 nº16 (1955)
18. O.Haxel et al., Phys. Rev. 75 (1949) 1766
19. M.G.Mayer, Phys. Rev. 75 (1949) 1969
20. H.J.Mang, Proceedings of the Winter College on Fundamental Nuclear Physics, World Scientific (1985)
21. P.Ring e P.Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer Verlag (1980)
22. J.M.Eisenberg e W.Greiner, Nuclear Theory (3 volumes), North-Holland Pub.Co. (1975)
23. C.Gustafson et al., Arkiv Fysik 36 (1967) 613
24. B.R.Mottelson, Rendiconti della Scuola Internazionale di Fisica, Corso XV, Varenna
25. D.J.Rowe, Nuclear Collective Motion, Methuen (1970)
26. S.T.Belyaev, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 31 nº11 (1959)
27. J.Bardeen et al., Phys. Rev. 108 (1957) 1175



28. L.S.Kisslinger e R.A.Sorensen, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 32 nº9 (1960)
29. M.Baranger e K.Kumar, Nucl. Phys. A122 (1968) 241
30. D.R.Bès e R.A.Sorensen, Adv. Nucl. Phys. 2 (1969) 129
31. C.Bloch e A.Messiah, Nucl. Phys. 39 (1962) 95
32. S.G.Nilsson e O.Prior, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 32 nº16 (1961)
33. M.Baranger e M.Vénéroni, Ann. Phys. (New York) 114 (1978) 123
34. D.R.Bès, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 33 nº33 (1961)
35. D.L.Hill e J.A.Wheeler, Phys. Rev. 89 (1953) 1102
36. F.M.H.Villars e G.Cooper, Ann. Phys. (New York) 56 (1970) 224
37. A.A.Raduta et al., Nucl. Phys. A272 (1976) 11
38. H.Toki e A.Faessler, Nucl. Phys. A253 (1975) 231
39. A.Faessler, Rep. Prog. Phys. 45 (1982) 653
40. A.Messiah, Quantum Mechanics (2 volumes), North-Holland Pub.Co. (1974)
41. M.Baranger e K.Kumar, Nucl. Phys. A110 (1968) 490
42. R.A.Uher e R.A.Sorensen, Nucl. Phys. 86 (1966) 1
43. Yu.V.Sergeenkov e V.M.Sigalov, Nucl. Data Sheets 49 (1986) 639
44. C.M.Lederer e V.S.Shirley eds., Table of Isotopes, 7* ed., John Wiley & Sons. (1978)
45. A.K.Kerman, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 30 nº15 (1956)
46. R.B.Firestone, Nucl. Data Sheets 52 (1987) 715
47. J.Stachel et al., Nucl. Phys. A383 (1982) 429
48. N.Imanishi et al., Nucl. Phys. A205 (1973) 531
49. V.R.Vanin, Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo (1984)
50. K.Kumar et al., Phys. Rev. C16 (1977) 1235
51. J.Blachot, Nucl. Data Sheets 45 (1985) 701
52. H.-W.Müller e C.Chmielewska, Nucl. Data Sheets 48 (1986) 663
53. K.Kumar, Nuclear Models and the Search for Unity in Nuclear Physics, Universitetsforlaget, Universidade de Bergen (1984)
54. M.Brack e H.C.Pauli, Nucl. Phys. A207 (1973) 401

55. D.R.Bès et al., Nucl. Phys. A143 (1970) 1
56. A.R.Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press (1957)
57. D.M.Brink e G.R.Satchler, Angular Momentum, Clarendon Press - Oxford (1968)
58. A.Bohr, Rev. Mod. Phys. 48 (1976) 365
59. H.Dias, Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo (1980)
60. H.J.Mang et al., Nucl. Phys. 64 (1965) 353
61. D.R.Inglis, Phys. Rev. 96 (1954) 1059