

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA

FACULTAD DE CIENCIAS

UN MODELO MICROSCOPICO PARA MOLECULAS NUCLEARES EN UNA DIMENSION



DIRECTOR DE TESIS: DR. PETER OTTO HESS BECHSTEDT



BEACE CAD DE CHENCIAE SUE DIOL RECOLAR MEXICO, D. F. HUMELIN

1997

وربوا بالمواصف المقال المتحاف المحافي





Universidad Nacional Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



VNIVERIDAD NACIONAL AVFNMA DE MEXICO

> M. en C. Virginia Abrín Batule Jefe de la División de Estudios Profesionales de la Facultad de Ciencias Presente

Comunicamos a usted que hemos revisado el trabajo de Tesis: "UN MODELO MICROSCOPICO PARA MOLECULAS NUCLEARES EN UNA DIMENSION"

realizado por FERNANDO BENITEZ MARTINEZ

con número de cuenta 9251745-3, pasante de la carrera de FISICA

Dicho trabajo cuenta con nuestro voto aprobatorio.

Atentamente

Director de Tesis DR. PETER OTTO HESS BECHSTEDT . Propietario DRA. ALICIA OLIVER GUTIERREZ Propietario Propietario DR. JORGE HIRSCH Suplence DR. ARTURO MENCHACA ROCT DR. ROELOF BIJKER Suplence l\$ Consejo Departamental de Física DR. ROBERTO ALEJANDRO RUELAS MAYORGA

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México las facilidades que me otorgó para realizar el presente trabajo. Además agradezco a todas las personas que de alguna manera me ayudaron a completar esta tesis.

Contenido

1	Int	roducción	i	
2	Мо	delo simpléctico del núcleo en una dimensión	1	
	2.1	El hamiltoniano simpléctico	1	
	2.2	Cálculo de los elementos de matriz	5	
	2.3	Teoría de grupos del modelo microscópico	8	
	2.4	El modelo simpléctico contraído	12	
3	EL	nétodo de Hartree-Fock	19	
	3.1	Introducción	19	
	3.2	El principio variacional	19	
	3.3	La energía de Hartree-Fock	21	
	3.4	Cálculo de la energía de Hartree-Fock	21	
4	Méi	todo de Tamm-Dankoff	27	
	4.1	Ecuación secular	27	
	4.2	Aplicación del método de Tamm-Dankoff	29	
5	Modelo simpléctico para moléculas nucleares			
	5.1	Descripción y desarrollo histórico	33	
	5.2	Extensión del modelo simpléctico	34	
6	Соп	clusiones	48	
A	Coo	rdenadas de Jacobi	50	
в	Cálc	culo de la norma del estado N)	52	
С	Segu	ında cuantización	54	
	$C.\tilde{1}$	Operadores de creación y aniquilación	54	
	C 2	Operadores de compo en el espacio de coordenadas	55	

C 3	Representación de operadores		56
C.4	Aplicación de la segunda cuanti	zación	57
		. •	

.

Introducción

Inmediatamente después de la deteccióon del neutron [1], Heisenberg [2] e Ivanenko [3] postularon, de manera independiente, las bases de la física nuclear: el núcleo consiste de dos tipos de nucleones, los protones y los neutrones. El estudio de la interacción de los nucleones, los protones y los neutrones. El estudio de la interacción de los estudios de la física nuclear. Aunque, una derivación completa del potencial de dos nucleones a partir de la teoría mesónica es posible, la solución no es del todo satisfactoria, por esto, la física nuclear de muchos cuerpos se ha confinado a potenciales fenomenológicos o semi-fenomenológicos. Debido a lo cual, las teorías nucleares se han formulado a partir de "modelos" nucleares. La teoría microscópica del núcleo se basa en el uso de potenciales fenomenológicos de un sistema nucleón-nucleón, en la ecuación de Schrödinger de un sistema

Dos avances significativos han tenido gran impacto en la comprensión de la estructura nucleur: el modelo de capas de partícula independiente [4] y el modelo colectivo, estos dos modelos se combinaron rápidamente para dar un modelo unificado [5], en el cual, los nucleones se mueven de manera independiente en un potencial promedio con grados de libertad colectivos. Este modelo en sus diferentes formas ha dominado la teoría de la estructura nuclear durante mucho tiempo.

A partir de los trabajos de Elliott [6] se han logrado avances para establecer una teoría algebráica que describa los fenómenos colectivos que se dan en el núcleo. Estos modelos algebráicos se apoyan en el concepto de grupos dinámicos, los cuales difieren de los grupos de simetría. Un grupo de transformaciones de simetría deja el hamiltoniano invariante y da lugar a degeneraciones en los estados del sistema, los cuales, contienen representaciones del grupo. Por otro lado un grupo dinámico requiere sólamente

i

que un grupo de eigenestados pertenezcan a una representación irreducible del grupo, pero no requiere que todos los estados de una representación irreducible sean degenerados. Un ejemplo es el oscilador armónico en 3 dimensiones, para el cual el grupo dinámico es Sp(6,R), mientras que el grupo de simetrías es SU(3), el cual es un subgrupo del primero.

Así, el grupo simpléctico es el grupo dinámico apropiado para una descripción de un sistema de muchos cuerpos con movimiento colectivo. El hecho de que el grupo simpléctico es un grupo dinámico para el oscilador armónico, el cual juega un papel muy importante en el modelo de capas, facilita la construcción de un formalismo simpléctico del modelo de capas.

Como se mencionó anteriormente, los trabajos de Elliott mostraron que los modelos algebráicos pueden describir de manera efectiva las excitaciones colectivas del núcleo. Utilizando el modelo de capas y las propiedades de interacción nuclear de largo alcance (del tipo cuadrupolar), Elliott construyó el modelo SU(3) del núcleo. Más tarde se encontraron varias extensiones como el modelo pseudo-SU(3) [7], el cual, da cuenta de una simetría que aparece en núcleos pesados, luego, surgió el modelo simpléctico para núcleos ligeros [8][9], que toma en cuenta excitaciones entre capas y, el modelo pseudo-simplectico [10] que se aplica a núcleos pesados.

En la $ELAF^{1}$ [11], el Dr. Hess presentó una serie de pláticas sobre el modelo simpléctico uni-dimensinal de un núcleo y su posible extensión a un sistema de dos cúmulos, sin embargo, la discusión fue hecha de manera abstracta, sin cálculos explícitos.

Así, el objetivo de la presente tesis es verificar los resultados va presentados por el Dr. Hess y realizar cálculos de manera explícita; primero introduciremos el hamiltoniano del modelo de capas uni-dimensional y se presentará su relación con el grupo simpléctico, después calcularemos los elementos de matriz y realizaremos la diagonalización del hamiltoniano. para obtener los niveles de energía, y ver cómo varían con respecto a la magnitud de la interacción "cuadrupolar". También utilizaremos otros procedimientos para los cálculos de la energía del estado base como el método de Hartree-Fock y calcularemos la energía de los primeros estados excitados por medio del método de Tamm-Dankoff, esto con el fin de comparar cómo funcionan estas aproximaciones con respecto al modelo exacto. También usaremos una aproximación al modelo simpléctico llamado modelo simpléctico contraído, el cual, es muy útil cuando se trabaja en dimensiones mayores. Como último tema trataremos de extender el modelo simpléctico a un sistema de moléculas nucleares (esto se ha hecho para obtener potenciales geométricos, a partir del hamiltoniano microscópico [13]). Primero se

. The control of the second s

¹ Escuela Latinoamericana de Física, México D.F., Julio-Agosto 1995.

propone un hamiltoniano que sea igual al hamiltoniano del sistema unido, cuando la distancia relativa sea igual a cero y, que sea igual a la suma de dos hamiltonianos independientes cuando los cúmulos estén separados completamente. Aunque en este caso también se trata de un modelo unidimensional, trataremos de ver cómo es posible incorporar el principio de Pauli de manera efectiva dentro del modelo. Una vez hecho ésto se hará el cálculo de los elementos de matriz y se presentará el espectro de energía del sistema, como función de la distancia relativa de los cúmulos. Para así, finalmente, presentar las conclusiones que se desprendan de este trabajo.

El cálculo para el modelo en tres dimensiones no se presenta aquí debido a que, resulta ser muy complicado ya que para un sólo núcleo se tiene que trabajar con matrices de 300 × 300 lo cual da lugar a que para un sistema de dos cúmulos la dimensión "explote". También es importante recalcar que el estudio de un sistema uni-dimensional no es del todo irrealista, ya que a finales de los setentas un grupo de Bélgica [14] introdujo un modelo simpléctico simplificado en el cual sólamente tomaban en cuenta excitaciones paralelas al eje de simetría para el núcleo prolato y, perpendiculares al eje para un núcleo oblato. Además antes de construir un modelo realista para moléculas nucleares basado en el modelo simpléctico, es muy útil considerar el caso uni-dimensional para poder entender mejor el problema, ya que, muchas manipulaciones algebráicas y consideraciones físicas serán muy sencillas en este caso sin que se pierdan los aspectos físicos relevantes para el modelo en tres dimensiones, es decir, que varias de las propiedades que se presentan en tres dimensiones pueden entenderse a partir del modelo uni-dimensional.

Capítulo 2

Modelo simpléctico del núcleo en una dimensión

2.1 El hamiltoniano simpléctico

La mayoría de las teorías microscópicas comienzan construyendo un espacio de Hilbert de funciones de onda antisimétricas para muchos cuerpos y tratan de dividir este espacio infinito en un cierto número de subespacios que el hamiltoniano no puede conectar. Este caso no será la ecepción, y comenzaremos describiendo la interacción de un nucleón con el resto de los nucleones mediante un potencial promedio, el cuál, tomaremos como el oscilador armónico y, aunque existen otros potenciales que pueden describir mejor la interacción porque su estructura de grupo facilita de cierta manera los cálculos y, además, permite separar las componentes del centro de masa de una función de onda de muchas partículas. El oscilador armónico en una dimensión está descrito por el siguiente hamiltoniano

$$\mathbf{H}_{0} = \sum_{s=1}^{A-1} \left(\frac{1}{2m} p_{s}^{2} + \frac{m\omega^{2}}{2} x_{s}^{2} \right)$$
(2.1)

donde las coordenadas x_x y su momento conjugado p_x son las coordenadas de Jacobi [9] de un sistema de A partículas donde se se el índice que identifica a las partículas, además en la ec. (1.1) ya se ha extraído el centro de masa (ver apendice A). En tres dimensiones se considera la interacción espínórbita y, además, se agrega un término $\sum l_x^2$, lo cual no es posible en una dimensión.

1

Ahora, en vez de considerar las coordenadas y los momentos, trabajaremos con operadores de creación y aniquilación de los fonones de oscilación, estos operadores están descritos como:

$$\eta_{\sigma} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x_{\sigma} - i \frac{p_{\sigma}}{m\omega} \right) \tag{2.2}$$

$$\xi_{\sigma} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(x_{\sigma} + i \frac{p_{\sigma}}{m\omega} \right)$$
(2.3)

donde el primero representa el operador de creación y el segundo el de aniquilación. Estos operadores obedecen la regla de comutación

$$[\xi_i, \eta_j] = \delta_{i,j}. \tag{2.4}$$

La variable ω denota la frecuencia del oscilador. Con esto la ec. (1.1) adquire la forma

$$\mathbf{H}_{0} = \hbar \omega \sum_{s=1}^{A-1} \left(\eta_{s} \xi_{s} + \frac{1}{2} \right).$$
 (2.5)

Los niveles de energía de este hamiltoniano se separan en niveles o capas por intervalos de energía constantes de $\hbar\omega$. A partir de ahora la ecuación (1.5) la denotaremos como $\hbar\omega N$. Los estados del oscilador armónico los denotaremos como $|N\rangle$ donde N denota el eigenestado del operador N. Por otro lado usaremos la variable N_0 para representar el número de cuantos del estado más bajo, considerando que los niveles se llenan de manera densa a partir del más bajo, adicionalmente consideramos la existencia de "espín" y, por esto, colocamos sólamente dos nucleones en cada nivel, por ejemplo, si tenemos cuatro nucleones, se colocan dos en la capa 0 y dos en la capa 1, con lo cual tenemos $2^{\circ}0+2^{\ast}1=2$ cuantos de oscilación, lo que implica que $N_0 = 2 + \frac{1}{2}(4-1)$, donde el último término representa la energía de punto cero de las cuatro partículas (la expresión general para la energía del punto cero es $\frac{1}{2}(A-1)$).

La forma explícita de los eigenestados es

$$|N\rangle = \hat{N}_{N_0,n} \left(\sum_{s=1}^{A-1} \eta_s \eta_s \right)^n |N_0\rangle$$
 (2.6)

con $n = \frac{N-N_0}{2}$ igual al número de cuantos de excitación divididos entre dos, y $\bar{N}_{N_0,n}$ representa el factor de normalización, el cuál tiene la forma (ver apéndice B)

$$\hat{N}_{N_0,n} = \sqrt{\frac{(N_0 - 1)!}{4^n (N_0 + n - 1)! n!}}.$$
(2.7)

Un hamiltoniano que describa los fenómenos rotacionales dentro del modelo simpléctico consiste del oscilador armónico, que da la estructura de capas, y la interacción cuadrupolo-cuadrupolo, la cual se escoge debido a que para núcleos deformados la interacción de largo alcance es la que domína (ésta se puede aproximar mediante la interacción cuadrupolocuadrupolo) cuyos términos se expresan mediante los generadores del álgebra simpléctica. En una dimensión no existe interacción cuadrupolar pero, podemos introducir un término "equivalente" que es la interacción monopolar . Sin embargo, hay que tener cuidado, ya que, esto dará diferentes propiedades debido a que es equivalente a la interacción monopolar en tres dimensiones. El operador monopolar que usaremos tiene la forma

$$\mu^2 \mathbf{Q} = \mu^2 \sum_{\sigma=1}^{A-1} x_{\sigma}^2, \qquad (2.8)$$

con $\mu = \sqrt{\frac{h}{m\omega}}$ representando la longitud de oscilación. El operador **Q** se escoge de manera que no lleve unidades. En general las transiciones E2 en núcleos ligeros se pueden reproducir con los términos del oscilador armónico H₀ y con **Q**² (i.e. **H** = **H**₀ - $\frac{1}{2}\chi$ **Q**²). Sin embargo, el valor de χ que se necesita puede ser tan grande que el término **Q**² destruye el campo promedio que se introduce mediante el oscilador armónico, es decir, que para distancias grandes el potencial de oscilador armónico se pierde, ya que, **Q**² introduce un término proporcional a x^4 como se aprecia en la figura 1.1.

Con esto establecemos que es necesario remover la contribución de \mathbf{Q}^2 al campo medio y una vez hecho esto, entonces se puede considerar a \mathbf{Q}^2 una interacción residual compatible con la estrutura establecida por \mathbf{H}_0 . A partir de esto proponemos el siguiente hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 - \frac{1}{2}\chi \left(\mathbf{Q}^2 - (\mathbf{Q}^2)^{TE}\right).$$
(2.9)

El signo negativo indica que la interacción es atractiva y el factor $\frac{1}{2}$ se coloca por conveniencia. Además para no perder el campo promedio, dado por el oscilador armónico, por la presencia del término "cuadrupolar", le restamos el término $(\mathbf{Q}^2)^{TE}$, el cual, es un operador que reproduce la traza de \mathbf{Q} en todas las capas principales del oscilador, es decir, elimina la contribución de la interacción "cuadrupolar" en los estados dados por el oscilador armónico con respecto al estado $|N_0\rangle$. La introducción de la interacción "cuadrupolar" tiende a elongar la forma de la función de onda conforme χ aumenta, es decir, deforma el núcleo uni-dimensional.



Figura 2.1: Variación del potencial con respecto a la distancia cuando se considera un término "cuadrupolar".

A partir de los operadores (1.2) y (1.3) podemos escribir el operador ${f Q}$ como

$$\mathbf{Q} = \sum_{s=1}^{A-1} \left[\left(\eta_s \xi_s + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(\eta_s \eta_s + \xi_s \xi_s \right) \right].$$
(2.10)

Definimos los siguientes operadores

$$\mathbf{B}^{\dagger} = \sum_{\boldsymbol{s}=1}^{A-1} \eta_{\boldsymbol{s}} \eta_{\boldsymbol{s}} \qquad (2.11)$$

$$\mathbf{B} = \sum_{s=1}^{A-1} \xi_s \xi_s \tag{2.12}$$

estos operadores nos permiten escribir la ec. (1.10) de la siguiente manera

$$\mathbf{Q} = \mathbf{N} + \frac{1}{2}(\mathbf{B}^{\dagger} + \mathbf{B}). \tag{2.13}$$

Para determinar la contribución promedio de Q^2 , calculamos primero la contribución diagonal de la interacción "cuadrupolar" con respecto al estado $|N\rangle$

$$\frac{\langle N | \mathbf{Q}^2 | N \rangle}{\dim(N)} \tag{2.14}$$

donde dim(N) es la dimensión de la capa N pero, como en este caso se esta considerando un oscilador uni-dimensional, entonces es igual a uno. El resultado es

$$\frac{(N|\mathbf{Q}^2|N)}{dim(N)} = (N_0 + 2n)(N_0 + n + 1) + 2n(N_0 + n + 1)$$
(2.15)

donde $n = \frac{N-N_0}{2}$ representa el número total de cuantos de excitación dividído entre dos. Definiendo un operador $2n = N - N_0$, y considerando que el operador N_0 sólamente actúa sobre el estado $|N_0\rangle$, podemos defini

$$(Q^2)^{TE} = (\mathbf{N}_0 + 2\mathbf{n})(\mathbf{N}_0 + \mathbf{n} + 1) + 2\mathbf{n}(\mathbf{N}_0 + \mathbf{n} - 1).$$
(2.16)

Sustituyendo las ecs. (1.13) y (1.16) en (1.9) y simplificando obtenemos que el hamiltoniano simpléctico tiene la siguiente forma

$$\mathbf{H} = \hbar\omega\mathbf{N} - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{4} [(\mathbf{B}^{\dagger})^{2} + (\mathbf{B})^{2})] + \frac{1}{2} \mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{B} + [\mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{N} + \mathbf{N} \mathbf{B}] + (\mathbf{B}^{\dagger} + \mathbf{B}) - 2\mathbf{n} (\mathbf{N}_{0} + \mathbf{n} - 1) \right\}$$
(2.17)

2.2 Cálculo de los elementos de matriz

Ahora calcularemos el espectro del hamiltoniano anterior. Para esto, debemos determinar como actúan los operadores que aparecen en la ec. (1.15) sobre un estado $|N\rangle$. El primer término es proporcional a N y, al aplicarlo a un estado $|N\rangle$ obtenemos simplemente $N|N\rangle$, es decir, que obtenemos el número total de cuantos del estado. Para determinar B[†] procedemos de la siguiente manera

$$\begin{aligned} \mathbf{B}^{\dagger}|N\rangle &= \tilde{N}_{N_{0},n}\mathbf{B}^{\dagger}(\mathbf{B}^{\dagger})^{n}|N_{0}\rangle = \tilde{N}_{N_{0},n}(\mathbf{B}^{\dagger})^{n+1}|N_{0}\rangle \\ &= \frac{\tilde{N}_{N_{0},n}}{\tilde{N}_{N_{0},n+1}}\tilde{N}_{N_{0},n+1}(\mathbf{B}^{\dagger})^{n+1}|N_{0}\rangle \\ &= \frac{\tilde{N}_{N_{0},n}}{\tilde{N}_{N_{0},n+1}}|N+2\rangle. \end{aligned}$$

$$(2.18)$$

B es simplemente el conjugado hermitiano de \mathbf{B}^{\dagger} , lo que provoca que para poder determinar como actúa sobre cierto estado $|N\rangle$, sólamente es necesario conocer el conjugado hermitiano de la expresión (1.18), con lo cual obtenemos

$$\mathbf{B}|N\rangle = \frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n-1}} 4n(N_0 + n - 1)|N - 2\rangle$$
(2.19)

por medio de las dos últimas ecs. obtenemos

$$\mathbf{B}^{\dagger}\mathbf{B}|N\rangle = \frac{\hat{N}_{N_{0},n}}{\hat{N}_{N_{0},n-1}}4n(N_{0}+n-1)\mathbf{B}^{\dagger}|N-2\rangle$$

$$\mathbf{B}^{\dagger}\mathbf{B}|N\rangle = 4n(N_{0}+n-1)|N\rangle$$
(2.20)

de manera similar obtenemos

$$\begin{aligned} (\mathbf{B}^{\dagger})^{2}|N\rangle &= \frac{N_{N_{0},n}}{\tilde{N}_{N_{0},n+1}} \mathbf{B}^{\dagger}|N+2\rangle \\ (\mathbf{B}^{\dagger})^{2}|N\rangle &= \frac{\tilde{N}_{N_{0},n}}{\tilde{N}_{N_{0},n+2}}|N+4\rangle. \end{aligned}$$
 (2.21)

También tenemos

$$\mathbf{B}^{2} = \frac{\bar{N}_{\Lambda_{0},n}}{\bar{N}_{N_{0},n-2}} 4^{2} n(n-1)(N_{0}+n-1)(N_{0}+n-2)|N-4\rangle$$
 (2.22)

finalmente tenemos

$$B^{\dagger}N|N\rangle = NB^{\dagger}|N\rangle$$

$$B^{\dagger}N|N\rangle = \frac{\hat{N}_{N_{0},n}}{\hat{N}_{N_{0},n+1}}N|N+2\rangle \qquad (2.23)$$

$$NB|N\rangle = \frac{\hat{N}_{N_{0},n-1}}{\hat{N}_{N_{0},n-1}}4n(N-2)(N_{0}+n-1)|N-2\rangle$$

$$NB|N\rangle = \frac{\hat{N}_{N_{0},n}}{\hat{N}_{N_{0},n-1}}4n(N_{0}+2n-2)(N_{0}+n-1)|N-2\rangle. (2.24)$$

Los elementos de matriz del hamiltoniano (1.16) son

$$(N'|\mathbf{H}|N) = \hbar\omega N \delta_{N'N} - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{4} \left[\frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n+2}} \delta_{N'N+4} + \frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n-2}} 4^2 n \right. \\ \left. (n-1)(N_0 + n - 1)(N_0 + n - 2) \delta_{N'N-4} \right] + \frac{1}{2} 4n(N_0 + n - 1) \delta_{N'N} + \left[\frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n+1}} N \delta_{N'N+2} + \frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n-4}} 4n(N_0 + n - 1) \delta_{N'N} \right] \right\}$$

$$+2n-2)(N_0+n-1)\delta_{N'N-2} \bigg] + \bigg(\frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n+1}}\delta_{N'N+2} + \frac{\hat{N}_{N_0,n-1}}{\hat{N}_{N_0,n-1}}4n(N_0+n-1)\delta_{N'N-2}\bigg) - 2n(N_0+n-1)\delta_{N'N}\bigg\}.$$

$$(2.25)$$

La expresión anterior la podemos reducir a

$$\langle N'|\mathbf{H}|N\rangle = -2\chi \frac{\hat{N}_{N_0,n-2}}{\hat{N}_{N_0,n-2}} n(n-1)(N_0+n-1)(N_0+n-2)\delta_{N'N-4} - - 2\chi \frac{\hat{N}_{N_0,n-1}}{\hat{N}_{N_0,n-1}} n(N-1)(N_0+n-1)\delta_{N'N-2} + \hbar\omega\delta_{N'N} - \frac{\chi}{2}(N+1)\frac{\hat{N}_{N_0,n-1}}{\hat{N}_{N_0,n+1}}\delta_{N'N+2} - \frac{\chi}{8}\frac{\hat{N}_{N_0,n-2}}{\hat{N}_{N_0,n+2}}\delta_{N'N+4}.$$
 (2.26)

Por medio de los resultados del apéndice B, podemos sustituir los valores de los factores de normalización, con lo cual obtenemos

$$\langle N'|\mathbf{H}|N\rangle = -\frac{\chi}{2}\sqrt{n(n-1)(N_0+n-1)(N_0+n-2)}\delta_{N'N-4} - \chi(N-1)\sqrt{n(N_0+n-1)}\delta_{N'N-2} + \hbar\omega\delta_{N'N} - \chi(N+1)\sqrt{(n+1)(N_0+n)}\delta_{N'N+2} - \chi(N-1)\delta_{N'N+4} - \chi(N-1)\sqrt{(n+1)(n+2)(N_0+n)(N_0+n+1)}\delta_{N'N+4} - \chi(N-1)\delta_{N'N+4} - \chi(N-1$$

Es posible determinar el espectro del sistema diagonalizando la matriz dada por la ec. (1.27). Para ejemplificar los resultados, el cálculo se realizó tomando un sistema de 10 nucleones (ocupando las 5 primeras capas) y considerando 20 estados excitados, para diferentes valores del parámetro χ . Los resultados de este cálculo se presentan en la figura 1.2.

El rango de energía es muy grande y eso no permite apreciar los detalles en la gráfica. Sin embargo, podemos ver que conforme aumenta el valor de χ , la variación en los niveles de energía es pequeña, hasta que un valor de χ de 0.02, los niveles de energía experimentan variaciones mucho más marcadas. Es posible explicar este comportamiento si se observa la figura 1.3, en la cual se presenta el valor de expectación del número de cuantos de excitación



Figura 2.2: Espectro de energía para un sistema de 10 nucleones, considerando 20 estados excitados.

Cono se puede apreciar el valor de expectación se mantiene alrededor de 1, hasta que χ alcanza aproximadamente un valor de 0.02, es decir que hasta ese punto casi no existen mezclas, pero para valores mayores de χ el valor de espectación aumenta de manera abrupta lo cual significa que existan cada vez una mayor mezcla, por lo que aumenta el número de estados excitados que contribuyen al estado base, hasta que se alcanza un valor constante de (n) debido a que en este espacio sólamente se consideran 20 estados excitados y por lo tanto no existen estados con excitaciones mayores.

2.3 Teoría de grupos del modelo microscópico

Anteriormente se introdujeron los operadores \mathbf{B}^{\dagger} , $\mathbf{B} \mathbf{y} \mathbf{N}$. El primero aumenta el número de cuantos por dos, el segundo lo disminuye en la misma cantidad y el último indica simplemente el número de cuantos en una capa, es decir, que no cambia el número de cuantos. A continuación calculamos



Figura 2.3: Variación del valor de espectación del número de cuantos de excitación, con respecto a χ para un sistema de 10 nucleones

los conmutadores de estos operadores

$$[\mathbf{B}, \mathbf{B}^{\dagger}] = \left[\sum_{s} \xi_{s}^{2}, \sum_{t} \eta_{t}^{2}\right] = \sum_{s,t} [\xi_{s}^{2}, \eta_{t}^{2}]$$

$$= \sum_{s,t} (\xi_{s}[\xi_{s}, \eta_{t}^{2}] + [\xi_{s}, \eta_{t}^{2}]\xi_{s}) = 2\sum_{s} (\xi_{s}\eta_{s} + \eta_{s}\xi_{s})$$

$$= 2\sum_{s} (\eta_{s}\xi_{s} + 1 + \eta_{s}\xi_{s}) = 2\sum_{s} (2\eta_{s}\xi_{s} + 1) = 4\sum_{s} \left(\eta_{s}\xi_{s} + \frac{1}{2}\right)$$

$$= 4\mathbf{N}. \qquad (2.28)$$

También tenemos

$$[\mathbf{N}, \mathbf{B}^{\dagger}] = \left[\sum_{\sigma} \left(\eta_{\sigma}\xi_{\sigma} + \frac{1}{2}\right), \sum_{t} \eta_{t}^{2}\right]$$
$$= \sum_{\sigma,t} \eta_{\sigma}[\xi_{\sigma}, \eta_{t}^{2}] = 2\sum_{\sigma} \eta_{t}^{2}$$
(2.29)

$$[\mathbf{N}, \mathbf{B}^{\dagger}] = 2\mathbf{B}^{\dagger} \tag{2.30}$$

De la misma forma obtenemos

$$[N, B] = -2B. (2.31)$$

Las ecs. (1.27) a (1.29) muestran que los operadores son cerrados bajo conmutación. De hecho representan el álgebra del grupo simpléctico Sp(2,R), mientras que el operador N es el generador del subgrupo U(1).

Para el operador N, esto se demuestra de manera sencilla, primero calculamos la matriz de este operador en cierta representación particular y construimos el determinante. Debido a que las representaciones del oscilador armónico uni-dimensional tienen dimensión 1 se tiene una matriz de 1 × 1, así, que es igual a su determinante. El elemento de matriz del generador es simplemente $\langle N'|N|N \rangle$, por esto, obtenemos que para una transformación finita dada por:

$$\lim_{m \to \infty} \left(1 + i \frac{\alpha}{m} N \right)^m = e^{i\alpha N}$$

es decir mediante la aplicación de varios pasos infinitesimales, el elemento de matriz es simplemente

$$\langle N|exp(i\alpha \mathbf{N})|N\rangle = e^{i\alpha N}.$$
(2.32)

Debido a que el determinante es una fase, la transformación es unitaria. Sólo hay un grado de libertad, lo que nos lleva a que la transformación pertenece al grupo U(1).

Ahora trataremos de mostrar, en forma ilustrativa, que el álgebra completa corresponde a la del grupo simpléctico. Para esto usamos los operadores de posición y momento, los cuales, satisfacen las relaciones de conmutación $[x_s, p_t] = i\delta_{s,t}, s = 1, \ldots, A - 1$. Ahora utilizamos la siguiente notación

$$x_s = z_\alpha \quad para \quad \alpha = 1, \dots, A-1$$

(2.33)

$$p_s = z_{\alpha} para \ \alpha = A, \dots, 2(A-1).$$
 (2.34)

Las nuevas variable satisfacen la siguiente relación de conmutación

$$[z_{\alpha}, z_{\beta}] = ig_{\alpha,\beta} \tag{2.35}$$

donde

$$g_{\alpha,\beta} = \delta_{\alpha,(\beta+(A-1))}$$

$$g_{\alpha,\beta} = -\delta_{(\alpha+(A-1)),\beta}$$
(2.36)

para $\alpha, \beta = 1, \ldots, A - 1$. Esto es lo que se conoce como la métrica simpléctica y, bajo una transformación, esta métrica debe conservarse y es de aquí de donde viene el nombre de transformación simpléctica. El espacio fase es de dimensión 2(A-1). Por esto los generadores,

$$x_s x_t, \quad p_s p_t, \quad x_s p_t + \frac{\delta_{s,t}}{2},$$

conforman el álgebra del grupo Sp(2(A-1),R). Cuando además sumamos sobre el índice s, llegamos al álgebra del grupo Sp(2,R).

A parte de los generadores de Sp(2(A-1),R) y Sp(2,R) podemos identificar otro subconjunto de generadores de Sp(2(A-1),R), que es

$$\lambda_{s,t} = x_s p_t - x_t p_s \tag{2.37}$$

De manera equivalente es posible definir los generadores en términos de los operadores de creación y aniquilación. Los generadores dados anteriormente corresponden al grupo ortogonal O(A-1). Se puede mostrar de manera directa que estos generadores conmutan con los generadores del grupo Sp(2,R). Por esto, los grupos Sp(2,R) y O(A-1) forman un producto directo

$$Sp(2(A-1), R) \supset Sp(2, R) \times O(A-1)$$
 (2.38)

donde se incluyó el grupo de simetría como un subgrupo de O(A-1). El hecho de que este grupo esté contenido en O(A-1) es evidente ya que cualquier permutación, que es un elemento de S_A , puede escribirse como una rotación dentro del espacio de las variables de Jacobi x_a con s= 1,..., (A - 1).

Se puede mostrar [12] que el sistema de A nucleones está en una represen tación partícular de Sp(2(A-1)):los generadores de este grupo pueden dividirse en tres, los de aumento, los de disminución y los de peso. Estos generadores están dados por

$$\begin{split} \mathbf{B}_{\boldsymbol{r},t}^{\mathsf{T}} &= \eta_{\boldsymbol{r}}\eta_{t} \quad \forall \quad s,t \\ \mathbf{B}_{\boldsymbol{s},t} &= \xi_{\boldsymbol{s}}\xi_{t} \quad \forall \quad s,t \\ \mathbf{C}_{\boldsymbol{s},\boldsymbol{s}} &= \eta_{\boldsymbol{r}}\xi_{\boldsymbol{s}} + \frac{1}{2} \\ \mathbf{C}_{\boldsymbol{r},t} &= \eta_{\boldsymbol{s}}\xi_{t} \quad \forall \quad s>t \\ \mathbf{C}_{\boldsymbol{s},t} &= \eta_{\boldsymbol{s}}\xi_{t} \quad \forall \quad s>t \\ \mathbf{C}_{\boldsymbol{s},t} &= \eta_{\boldsymbol{s}}\xi_{t} \quad \forall \quad s$$

El estado de nemor energía de un sistema de A partículas es $|N = 0\rangle$ o $|N = 1\rangle$, al aplicar cualquier operador de descenso a este estado, el resultado es cero. El estado más bajo se clasifica por medio de los operadores de peso. Con la definición de los operadores de ascenso de tipo C el estado

más bajo, para el caso N=0, es aquel en el cual ninguna de las partículas tiene cuantos de oscilación. En el caso N=1 el estado más bajo es aquel en el cual el grado de libertad s=1 lleva un cuanto y todos los demás son cero, i.e. que el eigenvalor de $C_{s,s}$ es $\frac{3}{2}$ para s=1 y $\frac{1}{2}$ para el resto. Con esto tenemos que las dos representaciones posibles del grupo Sp(2(A-1)) en un sistema de A partículas están dadas por

$$\left[\left(\frac{1}{2}\right)^{A-1}\right] \quad para \quad N = 0 \tag{2.39}$$

$$\left[\frac{3}{2}\left(\frac{1}{2}\right)^{A-2}\right] \quad para \quad N=1 \tag{2.40}$$

Estas representaciones se conocen como "metaplécticas" [12] y se ha demostrado [13] que la representación de Sp(2,R) y la de O(A-1) son complementarias, es decir, que una vez que se da la representación de Sp(2,R)la representación de O(A-1) está fija. El grupo O(A-1) contiene al grupo de permutación S_A . Cuando llenamos de manera densa las capas del oscilador armónico tomando en cuenta el principio de Pauli, el número total de cuantos determina la representación del grupo $Sp(2, \mathbb{R})$. Este estado está caracterizado por el hecho de que al aplicarle el operador de descenso de Sp(2,R), dado por B, este se vuelve cero. Si se construyera un estado con dos cuantos menos deberíamos poner al menos un nucleón en un estado que ya está ocupado. Esto no puede ser una representación antisimétrica. por ésto, la aplicación del operador de peso de Sp(2,R) da la etiqueta de representación, es decir, que si denotamos al estado más bajo como $|N_0\rangle$ la etiqueta está dada por N_0 . Empezando con este estado se puede garantizar de manera automática la antisimetría. La aplicación de los generadores de Sp(2,R) a este estado no cambia la antisimetría, va que, los operadores son simétricos en los índices s.

2.4 El modelo simpléctico contraído

Los cálculos que se presentaron en la sección 1.1 son bastante sencillos, sin embargo, al llevar el problema a una dimensión mayor el problema se complica bastante. Por esto, se creó un procedimiento que simplifica los cálculos y, aunque, en una dimensión no sufren mingún cambio apreciable, usaremos esta simplificación en nuestro modelo uni-dimensional para ilustrar el procedimento.

Para empezar retomaremos el conmutador

$$[\mathbf{B}, \mathbf{B}^{\dagger}] = 4\mathbf{N} \tag{2.41}$$

Si se aplica este conmutador sobre un estado con N_0 cuantos y si este número es muy grande, entonces al definir

$$\mathbf{b} = \frac{1}{2\sqrt{N_0}}\mathbf{B}$$

$$\mathbf{b}^{\dagger} = \frac{1}{2\sqrt{N_0}}\mathbf{B}^{\dagger}$$
(2.42)

el conmutador anterior se escribe como

$$[\mathbf{b}, \mathbf{b}^{\dagger}] \simeq 1 \tag{2.43}$$

esta relación no cambiará mucho cuando se incluyen excitaciones del estado $|N_0\rangle$, siempre y cuando, estas excitaciones sean de orden mucho menor que N_0 . Las correcciones a la ec. (1.35) son del orden de $\frac{1}{4N_0}$. Por esto, es una buena aproximación tratar a los operadores b y b[†] como verdaderos operadores bosónicos (la ec. (1.43) es idéntica a la que se tiene para operadores bosónicos). Por otro lado, el operador N toma la forma siguiente

$$\mathbf{N} = 2\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b} + \mathbf{N}_0 \tag{2.44}$$

donde b'b representa la acción del operador n. Como podemos apreciar el operador N tiene dos contribuciones, la primera cuenta dos veces el número de bosones del tipo b[†], i.e., el número original de cuantos de excitación. La segunda contribución sólamente actua dentro del estado más bajo de U(1). En nuestro caso siempre da N_0 cuando se aplica al estado $|N_0\rangle$. Los estados que constituyen la base que incluye excitaciones entre capas son

$$|N| = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\mathbf{b})^n |N_0|$$
(2.45)

con $n = \frac{N-N_0}{2}$. Utilizamos los paréntesis redondos para denotar que se trabaja en el espacio contraído. Estos estados son muy parecidos a los estados originales, ecepto por el factor de normalización. Con estos nuevos operadores el hamiltoniano (1.17) lo podemos reescribir como

$$\mathbf{H} = \hbar\omega(2\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b} + N_{0}) - \frac{\chi}{2}N_{0}\{[(\mathbf{b}^{\dagger})^{2} + (\mathbf{b})^{2}] + 2\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b}\} - -\chi\sqrt{N_{0}}\{(\mathbf{b}^{\dagger}(N_{0} + 2\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b}) + (N_{0} + 2\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b})\mathbf{b}) + +2(\mathbf{b}^{\dagger} + \mathbf{b})\} - \chi N_{0}\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b}, \qquad (2.46)$$

la contribución diagonal de la interacción "cuadrupolar" se calculó de manera similar a como se hizo en la ec. (1.14), con lo que resulta

$$\frac{\langle N | \mathbf{Q}^2 | N \rangle}{dim(N)} = (N_0 + 2n)(N_0 + 2n + 1) + 2nN_0, \tag{2.47}$$

a partir de esto llegamos a que para el modelo contraído

$$(Q^{2})^{TE} = (N_{0} + 2\mathbf{n})(N_{0} + 2\mathbf{n} + 1) + 2\mathbf{n}N_{0}.$$
 (2.48)

Es importante notar que que las contribuciones $\sim n^2$ no contribuyen debido a la aproximación. De manera sencilla es posible calcular los elementos de matriz para cada uno de los operadores y, a partir de esto, es posible obtener el espectro de energía. Con ayuda de la ec. (1.45) tenemos

$$\mathbf{b}^{\dagger}|N) = \frac{1}{n!}(\mathbf{b}^{\dagger})^{n+1}|N_{0}\rangle = \frac{\sqrt{(n+1)!}}{\sqrt{n!}}\frac{1}{\sqrt{(n+1)!}}\mathbf{b}^{\dagger})^{n+1}|N_{0}\rangle$$
$$= \frac{\sqrt{(n+1)!}}{\sqrt{n!}}|N+2\rangle$$
$$\mathbf{b}^{\dagger} = \sqrt{n+1}|N+2\rangle.$$
(2.49)

También sabemos que $[\mathbf{b}, (\mathbf{b}^{\dagger})^n] = n(\mathbf{b}^{\dagger})^{n-1}$ con lo cual obtenemos

$$b|N) = \frac{1}{n!} b(b^{\dagger})^{n} |N_{0}\rangle = \frac{1}{n!} ([b, (b^{\dagger})^{n}] + (b^{\dagger})^{n} b) |N_{0}\rangle$$

= $\frac{1}{n!} [b, (b^{\dagger})^{n}] |N_{0}\rangle = \frac{1}{n!} n (b^{\dagger})^{n-1} |N_{0}\rangle$
= $\frac{n \sqrt{(n-1)!}}{\sqrt{n!}} |N-2\rangle$
 $b|N) = \sqrt{n} |N-2\rangle.$ (2.50)

A partir de los resultados anteriores obtenemos

٠.

$$(b^{\dagger})^{2}|N) = \sqrt{(n+1)(n+2)}|N+4)$$
 (2.51)

$$\mathbf{b}^{\dagger}\mathbf{b}|N) = n|N) \tag{2.52}$$

$$b^2|N\rangle = \sqrt{n(n-1)}|N-4\rangle,$$
 (2.53)

mediante estos resultados y la ec. (1.39) podemos determinar los elementos de matriz que son

$$(N'|\mathbf{H}|N) = \hbar\omega(2n\delta_{N'N} + N_0\delta_{N'N}) - \frac{\chi}{2}N_0\{\sqrt{(n+1)(n+2)}\delta_{N'N+4} + \sqrt{n(n-1)}\delta_{N'N-4} + 2n\delta_{N'N}\} - \chi\sqrt{N_0}\{N_0\sqrt{n+1} \\ \delta_{N'N+2} + 2n\sqrt{n+1}\delta_{N'N+2} + N_0\sqrt{n}\delta_{N'N-2} + \\ + 2\sqrt{n}(n-1)\delta_{N'N-2} + 2(\sqrt{n+1}\delta_{N'N+2} + \\ + \sqrt{n}\delta_{N'N-2})\} - \chi nN_0\delta_{N'N}.$$
(2.54)

Reagrupando téminos tenemos

$$(N'|\mathbf{H}|N) = -\frac{\chi}{2} N_0 \sqrt{n(n-1)} \delta_{N'N-1} - \chi \sqrt{nN_0} (N_0 + 2n) \delta_{N'N-2} + + \{2n(\hbar\omega - \chi N_0) + \hbar\omega N_0\} \delta_{N'N} - \chi \sqrt{(n+1)N_0} (N_0 + + 2(n+1)) \delta_{N'N+2} - \frac{\chi}{2} N_0 \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{N'N+4}.$$
(2.55)

Con esto obtenemos los diferentes niveles de energía y su comportamiento con respecto al parámetro χ .

Es posible comparar los resultados del cálculo simpléctico con los resultados de este modelo.

Como se puede apreciar de la figura 1.5, la diferencia entre los valores de energía que se obtiene mediante el modelo simpléctico y el modelo contraído, aumenta conforme aumenta el valor de χ . Así, para $\chi = 0$ la diferencia es igual a cero. Para el estado base la diferencia se mantiene casi nula, hasta un valor de $\chi \approx 0.0201$, a partir del cuál, el valor de energía que se obtiene mediante el modelo contraído es mayor que el que se obtiene mediante el modelo simpléctico. En general, la diferencia aumenta conforme aumenta el estado que se considera.

El método anterior se conoce como contracción del grupo Sp(2,R) y, por eso, el modelo se denomina "modelo simpléctico contraïdo". El proceso de "contracción" se describe de manera detallada en la ref. [15]. Los operadores b[†], b y 1 forman el álgebra del grupo de Weyl, W(1), en una dimensión. Por otro lado el operador N = $2b^{\dagger}b + N_0$ sigue siendo un generador del grupo U(1), debido a que el commutador de N con b[†] o con b

15



Figura 2.4: Variación de los niveles de energía, calculados con el modelo contrado, con respecto a χ para un sistema de 10 nucleones considerando 20 estados.



Figura 2.5: Diferencia entre los valores de energía calculados con el modelo simpléctico y con el modelo contraído, para diferentes valores de χ , en sistema de 10 nucleones considerando 20 estudos excitados.

siempre da como resultado un generador de grupo de Weyl, la contracción del grupo simpléctico, Sp(2,R), lleva al producto semi-directo $W(1) \wedge U(1)$.

En general, este modelo funciona bien y se ha utilizado para estudiar núcleos reales [16]. Esto se debe a que en la contracción se supone que el número de cuantos excitados es pequeño comparado con el número de cuantos del estado más bajo, el cual se da colocando los nucleones de manera densa en las capas del oscilador. Esto concuerda con la idea de que la distribución de Fermi es muy parecida a una distribución rectangular. Como consecuencia, los estados que se encuentren arriba del nivel de Fermi casi no están ocupados y, si una parte mayor de la función de onda se coloca ahí entonces, la violación que se da del principio de Pauli es "pequeña". Esto nos muestra que se debe tener cuidado, ya que, para excitaciones más grandes el modelo contraído no funcionará de manera correcta.

Capítulo 3

El método de Hartree-Fock

3.1 Introducción

Ahora calcularemos la energía del estado base de un núcleo a partir del nétodo de Hattree-Fock. Primero discutiremos el método variacional de manera general, para luego describir el método de Hartree-Fock en detalle y finalmente lo aplicaremos al modelo que estamos considerando.

and a market share to a second the second second

3.2 El principio variacional

Primero demostraremos que la ecuación de Schrödinger

$$H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle \tag{3.1}$$

es equivalente a la ecuación variacional

$$\delta E[\Psi] = 0 \tag{3.2}$$

donde

$$E[\Psi] = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}.$$
 (3.3)

La variación (2.2) se puede obtener a partir de la ec. (2.3)

$$\langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle + i \langle \Psi | H - E | \delta \Psi \rangle = 0 \tag{3.4}$$

Debido a que $|\Psi\rangle$ es, en general, una función compleja podemos llevar a cabo la variación de la parte real y la parte imaginaria de manera independiente,

lo que es equivalente a variar $|\delta\Psi\rangle y \langle \delta\Psi |$ por separado. Así, la ec. (1.24) es válida para cualquier $|\delta\Psi\rangle$ con lo cual es posible reemplazar $|\delta\Psi\rangle$ por $i|\delta\Psi\rangle$ y obtener

$$-i\langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle + i\langle \Psi | H - E | \delta \Psi \rangle. \tag{3.5}$$

A partir de esto y, tomando en cuenta la ec. (2.4) encontramos:

$$\langle \delta \Psi | H - E | \Psi \rangle = 0 \tag{3.6}$$

y la correspondiente ec. para el complejo conjugado. Debido a que $|\delta\Psi\rangle$ es arbitraria la ec. (2.6) es equivalente al problema de valores propios.

La aproximación de éste método variacional consiste en que las funciones $|\Psi\rangle$ están restringidas a un conjunto de funciones de prueba que son matemáticamente muy simples y, si la función exacta no se encuentra en el conjunto, entonces la solución es una aproximación de la eigenfunción. El método variacional es especialmente útil para determinar el estado base del sistema, ya que, para cualquier función de prueba $|\Psi\rangle$ se cumple

$$E[\Psi] \ge E_0. \tag{3.7}$$

Así, la energía del estado base, E_0 , siempre será una cota inferior para la energía que se obtenga mediante el cálculo variacional. Para demostrar la validez de la desigualdad anteriore, escribimos la función de prueba en términos de las eigenfunciones del hamiltoniano

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} a_n |\varphi_n\rangle, \qquad (3.8)$$

donde las funciones $|\varphi_n\rangle$ cumplen la siguiente ec. de valores propios

$$H|\varphi_n\rangle = E_n|\varphi_n\rangle. \tag{3.9}$$

Sustituyendo la ec. (2.8) en la ec. (2.3) obtenemos

$$E[\Psi] = \frac{\sum_{n,n'} a_n^* a_n E_n \delta_{nn'}}{\sum_n |a_n|^2} \ge \frac{\sum_n |a_n|^2 E_0}{\sum_n |a_n|^2} = E_0.$$
(3.10)

Esta expresión es igual a la desigualdad (2.7). Si estamos interesados en algún estado excitado debenos llevar a cabo la variación dentro de un subespacio que sea ortogonal a $|\varphi_0\rangle$ (i.e. $\langle \Psi_n | \varphi_0 \rangle = 0$) y así, en principio, se puede calcular todo el espectro.

3.3 La energía de Hartree-Fock

Ahora calculamos la expresión general para la energía de Hartree-Fock dada por

$$E^{HF} = \langle \Psi | H | \Psi \rangle \tag{3.11}$$

donde, como se mencionó anteriormente, $|\Psi\rangle$ es una aproximación del estado base. En este caso la función es el determinante de Slater que es $|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{A} a_i^* |-\rangle$. Empezamos con el hamiltoniano para muchos cuerpos, H, y lo representamos en segunda cuantización mediante los operadores c_i^+ y c_i (ver apendice C)

$$\mathbf{H} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^+ c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^+ c_{l_2}^+ c_{l_4} c_{l_5}$$
(3.12)

donde

$$\bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3}. \tag{3.13}$$

El teorema de Wick permite calcular la energía (2.11) como una función de la densidad $\rho = (\Psi[c_i^+, c_\mu]\Psi)$ de una partícula, esta densidad representa la amplitud de probabilidad de que una partícula se encuentre en determinado estado.

$$E^{HF} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \langle \Psi | c_{l_1}^+ c_{l_2} | \Psi \rangle + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \langle \Psi | c_{l_1}^+ c_{l_2}^+ c_{l_4} c_{l_3} | \Psi \rangle$$

$$= \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \rho_{l_2 l_1} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_3 l_1} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_4 l_3}$$

$$= Tr(t\rho) + \frac{1}{2} Tr_1 Tr_2(\rho \bar{\nu} \rho). \qquad (3.14)$$

La ec. (2.14) no depende de la base y por esto podemos utilizarla para dar una expresión de la energía de Hartree-Fock en su propia base $\{\varphi_k\}$, en la cual, ρ es diagonal con eigenvalores 0 y 1.

$$E^{HF} = \sum_{i=1}^{A} t_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{A} \bar{v}_{ij,ji}$$
(3.15)

3.4 Cálculo de la energía de Hartree-Fock

Ahora se calcula la energía de Hartree-Fock a partir del hamiltoniano simpléctico

$$\mathbf{H} = -\hbar\omega\mathbf{N} - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{4} [(\mathbf{B}^{\dagger})^2 + (\mathbf{B})^2)] + \frac{1}{2} \mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{B} + [\mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{N} + \mathbf{N} \mathbf{B}] + \right.$$

$$+(\mathbf{B}^{\dagger}+\mathbf{B})-2\mathbf{n}(\mathbf{N}_{0}+\mathbf{n}-1)\bigg\}.$$
(3.16)

-

Tomando en cuenta que $-2n(N_0 + n - 1) = \frac{1}{2}(N_0(N_0 - 2) - N(N - 2))$ el hamiltoniano anterior, en segunda cuantización, se escribe como (ver apéndice C)

$$\begin{split} \mathbf{H} &= \hbar\omega\sum_{m}(m+\frac{1}{2})a_{m}^{+}a_{m} - \frac{\chi}{2}\left\{\frac{1}{4}\left[\sum_{m}\sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)}\right] \\ &(a_{m+4}^{+}a_{m}^{+}a_{m}^{+}a_{m}^{+}a_{m}^{+}) - \sum_{mn'}\sqrt{(m'+1)(m'+2)(m+1)(m+2)} \\ &(a_{m'+2}^{+}a_{m+2}^{+}a_{m'}a_{m}^{+}a_{m'}a_{m}^{+}a_{m'+2}^{+}a_{m+2}^{+})\right] + \frac{1}{2}\left(\sum_{m}(m+1)(m+2)\right) \\ &a_{m+2}^{+}a_{m+2}^{+} - \sum_{mn'}\sqrt{(m'+1)(m'+2)(m+1)(m+2)}a_{m'+2}a_{m}^{+}a_{m}^{$$

A partir del hamiltoniano anterior obtenemos que la energía de Hartree-Fock está dada por:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = E^{HF} = \hbar \omega \sum_{m} (m + \frac{1}{2}) \delta_{m,m} - \\ - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{4} \left[\sum_{m} \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)} (\delta_{m+4,m} + \delta_{m,m+4}) - \sum_{mm'} \sqrt{(m'+1)(m'+2)(m+1)(m+2)} \right] \right\}$$

$$\left(\delta_{m'+2,m} \delta_{m+2,m'} + \delta_{m',m+2} \delta_{m,m'+2} \right) + \frac{1}{2} \left(\sum_{m} (m+1)(m+1)(m+2) \delta_{m+2,m+2} - \sum_{m,m'} \sqrt{(m'+1)(m'+2)(m+1)(m+2)} \delta_{m'+2,m} \delta_{m,m'} \right) + \left[\sum_{m} (m+\frac{1}{2}) \sqrt{(m+1)(m+2)} (\delta_{m+2,m} + \delta_{m,m+2}) - \sum_{m,m'} (m+\frac{1}{2}) \sqrt{(m'+1)(m'+2)} (\delta_{m'+2,m} \delta_{m,m'} + \delta_{m,m'+2} \delta_{m',m}) \right] + \left(\sum_{m} \sqrt{(m+1)(m+2)} (\delta_{m+2,m} + \delta_{m,m'+2} \delta_{m',m}) \right) + \frac{1}{2} N_0 (N_0 - 2) - \frac{1}{2} \sum_{m} (m+\frac{1}{2})^2 \delta_{m,m} + \frac{1}{2} \sum_{m,m'} (m+\frac{1}{2}) (m'+\frac{1}{2}) \delta_{m,m'} \delta_{m,m'} + \sum_{m} (m+\frac{1}{2}) \delta_{m,m} \right\}$$
(3.17)

Como se puede apreciar los sumandos de la ec. anterior que contiene términos como: $\delta_{m+4,m}, \delta_{m'+2,m} \delta_{m+2,m'}, \delta_{m',m+2} \delta_{m,m'+2}, \delta_{m+2,m}, \delta_{m'+2,m} \delta_{m,m'}$ $\forall m, nt', no contribuyen i.e. son iguales a cero, ya que, intentan cambiar el estado base a un estado más bajo.$

$$E^{\prime\prime\prime}F = \sum_{m} \left[\hbar\omega(m+\frac{1}{2}) - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{2} \left((m+1)(m+2) - - \sqrt{(m+1)(m+2)(m+1)(m+2)} \right) + (m+\frac{1}{2}) \right\} \right] - \frac{\chi}{4} N_0(N_0 - 2).$$
(3.18)

Reescribiendo la expresión anterior tenemos

.

$$E^{HF} = \sum_{m} \left[\hbar \omega (m + \frac{1}{2}) - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{2} \left((m + 1)(m + 2) - (m + 1)(m + 2) \right) + (m + \frac{1}{2}) \right\} \right] - \frac{\chi}{4} N_0 (N_0 - 2).$$
(3.19)



Figura 3.1: Cáculo de la energía mediante el metodo de Hartree-Fock para un sistema de 10 nucleones y para diferentes valores de χ .

Simplificando la ec. anterior llegamos a

$$E^{HF} = \sum_{m} \left[\hbar \omega \left(m + \frac{1}{2} \right) - \frac{\chi}{2} \left(m + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{\chi}{4} N_0 (N_0 - 2).$$
(3.20)

Finalmente reagrupando términos obtenemos

$$E^{HF} = \sum_{m} \left[\left(\hbar \omega - \frac{\chi}{2} \right) \left(m + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{\chi}{4} \left[N_0 (N_0 - 2) \right]. \tag{3.21}$$

A partir de la ec. (2.22) obtenemos la energía del estado base para diferentes valores de χ (ver figura 2.1).

Como se puede apreciar, la energía disminuye de manera lineal conforme aumenta el valor de χ y esta variación se da en un rango pequeño que va de 53 a 43 MeV para $0 \le \chi \le 0.03$.

También es posible comparar estos resultados con lo obtenido mediante el cálculo exacto, esta comparación se presenta en la figura 2.2

A partir de la figura 2.2 podemos apreciar que para valores pequeños de χ , i.e. desde $\chi = 0$ hasta $\chi \approx 0.022$ la diferencia entre los valores



Figura 3.2: Comparación de la energía del estado base, para un sistema de 10 nucleones, obtenida mediante el método de Hartree-Fock y el resultado obtenido mediante el modelo simpléctico

que se obtiene mediante ambos métodos es muy pequeña por lo que en este rango ambos cálculos son bastante efectivos. A partir de este valor la diferencia empieza a ser cada vez más notoria. Esto concuerda con los resultados presentados en el capítulo 1, ya que, es a partir de este valor de χ que el modelo simpléctico empieza a fallar, debido a las mexclus que se presentan. Por lo que para analizar sistemas en el que χ tiene valores grandes, el método de Hatree-Fock, en primera aproxinación, parece no ser conveniente. Sin embargo, es posible explicar este hecho.

Como se mencionó en la sección 2.2, la ecuación de eigenvalores (2.1) es equivalente a la ecuación variacional (2.2). En nuestro caso tonamos una base para diagonalizar el hamiltoniano y así obtener una expresión para la energía. Aplicando la ecuación variacional a la expresión que se tiene para la energía del estado base, podemos obtener una nueva base para diagonalizar el hamiltoniano (2.17) y, así obtener una nueva base para la energía del estado base, que concuerde aun más con el valor que se obtiene con el modelo simpléctico.

Este procedimiento lo podemos repetir varias veces para mejorar las funciones de prueba, es decir que se aproximen a los estados del oscilador armónico, y que como consecuencia de esto la energía del estado base que se obtiene mediante el método de Hartree-Fock se parezca cada vez más a la que se obtiene con el modelo original.

Capítulo 4

Método de Tamm-Dankoff

4.1 Ecuación secular

Llenando el potencial del modelo de capas con A nucleones hasta un cierto nivel de Fermi, tenemos el conjunto de las excitaciones de una, dos, tres o N partículas forman un conjunto ortogonal completo que se puede utilizar para expresar la función de onda del estado base, $|0\rangle$, o la de algún estado excitado, $|\nu\rangle$ del sistema de varios nucleones. La solución exacta de la ecuación de Schrödinger puede obtenerse mediante la diagonalización del hamiltoniano en el espacio completo del modelo de capas o mediante una variación de los siguientes coeficientes de expansión

$$|0\rangle = C_0^0 |\Psi\rangle + \sum_{m,i} C_m^0 a_m^+ a_i |\Psi\rangle + \frac{1}{4} \sum_{m,n,i,j} C_m^0 a_m^+ a_n^+ a_i a_j |\Psi\rangle + \dots \quad (4.1)$$

$$|\nu\rangle = C_0^{\nu}|\Psi\rangle + \sum_{m,i} C_{mi}^{\nu} a_m^+ a_i |\Psi\rangle + \frac{1}{4} \sum_{m,n,i,j} C_{mn,ij}^{\nu} a_m^+ a_n^+ a_i a_j |\Psi\rangle + \dots$$
(4.2)

donde se han restringido los índices m,n (ij) para indicar una posición arriba (abajo) del nivel de Fermi. El determinante $|\Psi\rangle$ se obtiene llenando los niveles más bajos del potencial de manera densa pero, en general, lo que se hace es aproximar el procedimiento anterior mediante un potencial de una partícula. Así, el operador $a_m^*a_i$ se encarga de eliminar una partícula que se encuentre abajo del nivel de Fermi y crea una partícula por arriba del nivel de Fermi.

La diagonalización exacta del hamiltoniano en el espacio completo del modelo de capas es una tarea que no se puede resolver de manera exacta. Por esto la ec. (3.2) se aproxíma de la siguiente manera

$$|\nu\rangle \simeq C_0^{\nu}|\Psi\rangle + \sum_{m,i} C_{mi}^{\nu} a_m^+ a_i |\Psi\rangle.$$
(4.3)

Como se puede ver en esta aproximación sólamente se toman en cuenta excitaciones de una partícula y un agujero. Debido a que $\langle \Psi | H a_m^+ a_i | \Psi \rangle = 0$, vemos que la ec. (3.3) implica que el estado base se mantiene como un determinante, por lo cual, un estado excitado se puede expresar como

$$|\nu\rangle = \sum_{m,i} C^{\nu}_{mi} a^+_m a_i |\Psi\rangle. \tag{4.4}$$

Usando la ecuación anterior como un ansatz variacional obtenemos

$$|\delta\nu\rangle = \sum_{m,i} a_m^+ a_i |\Psi\rangle \delta C_{mi}^{\nu}. \tag{4.5}$$

Una ecuación secular para determinar los eigenvalores y los coeficientes de la expansión es:

$$\sum_{n,j} \{ \langle \Psi | a_i^+ a_m H a_n^+ a_j | \Psi \rangle - E_\nu \langle \Psi | a_i^+ a_m a_n^+ a_j | \Psi \rangle \} C_{nj}^\nu = 0.$$
(4.6)

La ecuación anterior se puede reescribir de la siguiente manera

$$\sum_{n,j} \langle \Psi | a_i^+ a_m [H, a_n^+ a_j] | \Psi \rangle C_{nj}^{\nu} = (E_{\nu} - E_0^{IIF}) C_{mi}^{\nu}.$$
(4.7)

El conmutador anterior tiene la forma:

$$\begin{aligned} [H, a_n^+ a_j] &= \sum_r \{t_{rn} a_r^+ a_j - t_{jr} a_n^+ a_r + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{r,s,t} \hat{v}_{rsnt} a_r^+ a_s^+ a_t a_j - \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \sum_{r,s,t} \hat{v}_{jrst} a_n^+ a_r^+ a_s a_t (4.8) \end{aligned}$$

Con lo que finalmente llegamos a la llamada ecuación de Tanm-Dankoff

$$\sum_{n,j} \{ (\epsilon_m - \epsilon_i) \delta_{mn} \delta_{ij} + \hat{v}_{rent} \} C_{nj}^{\nu} = E_{\nu}^{TDA} C_{mi}^{\nu}, \tag{4.9}$$

donde ϵ_j denota la energía de Hartree-Fock de una partícula, además E_{ν}^{HF} ha sido igualada a cero mediante un escalamiento apropiado de la energía y E_{ν}^{TDA} es la energía del estado excitado $|\nu\rangle$ en la aproximación de Tamm-Dankoff.

4.2 Aplicación del método de Tamm-Dankoff

A partir de la expresión para el hamiltoniano en segunda cuantización

$$\mathbf{H} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^+ c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^+ c_{l_2}^+ c_{l_4} c_{l_3}$$
(4.10)

y, con ayuda de los resultados del apéndice C, tenemos que la expresión para el hamiltoniano en segunda cuantización es:

$$\mathbf{H} = \sum_{m,i} \left\{ \hbar \left(i + \frac{1}{2} \right) \delta_{m,i} - \frac{\chi}{2} \left(\frac{1}{4} \sqrt{(i+1)(i+2)(i+3)(i+4)} \delta_{m,i+4} + \frac{1}{4} \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)} \delta_{m+4,i} + \frac{1}{2} i(i-1) \delta_{m,i} + \frac{1}{4} \sqrt{(m+1)(m+2)(m+2)(m+3)(m+4)} \delta_{m+4,i} + \frac{1}{2} i(i-1) \delta_{m,i} + \frac{1}{4} \left(i + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(i+1)(i+2)} \delta_{m,i+2} + \left(m + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(m+1)(m+2)} \delta_{m+2,i} \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \left(i + \frac{1}{2} \right)^2 \delta_{m,i} + \left(i + \frac{1}{2} \right) \delta_{m,i} \right) \right\} a_m^+ a_i + \frac{1}{4} \sum_{m,i,n,j} \frac{\chi}{2} \left\{ \sqrt{(n+1)(n+2)(i+1)(i+2)} \delta_{m,n+2} \delta_{j,i+2} + \frac{1}{\sqrt{(m+1)(m+2)(j+1)(j+2)}} \delta_{m,n+2} \delta_{j,i+2} + \frac{1}{\sqrt{(m+1)(m+2)(j+1)(j+2)}} \delta_{m,n+2} \delta_{i,j+2} + \frac{1}{\sqrt{(m+1)(n+2)(j+1)(j+2)}} \delta_{m,n+2} \delta_{i,j+2} + 4 \left(i + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n+1)(n+2)(j+1)(j+2)} \delta_{m,n+2} \delta_{i,j+2} + 4 \left(i + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \delta_{i,j} + 4 \left(n + \frac{1}{2} \right) \sqrt{(j+1)(j+2)}} \delta_{m,n} \delta_{m,n} \delta_{i,j+2} - 2 \left(n + \frac{1}{2} \right) \left(i + \frac{1}{2} \right) \delta_{m,n} \delta_{i,j} \right\} a_m^+ a_j^+ a_n a_i - \frac{\chi}{4} N_0 (N_0 - 2).$$

Mediante esta ecuación vemos que el factor \hat{v}_{mjin} está dado como

$$\begin{split} \hat{\upsilon}_{mjin} &= \frac{\chi}{2} \left\{ \sqrt{(n+1)(n+2)(i+1)(i+2)} \delta_{m,n+2} \delta_{j,i+2} + \\ &+ \sqrt{(m+1)(m+2)(j+1)(j+2)} \delta_{m,m+2} \delta_{i,j+2} + \\ &+ 2\sqrt{(n+1)(n+2)(j+1)(j+2)} \delta_{m,n+2} \delta_{i,j+2} + 4\left(i+\frac{1}{2}\right) \\ &\sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{m,n+2} \delta_{i,j} + 4\left(n+\frac{1}{2}\right) \sqrt{(j+1)(j+2)} \\ &\delta_{m,n} \delta_{i,j+2} - 2\left(n+\frac{1}{2}\right) \left(i+\frac{1}{2}\right) \delta_{m,n} \delta_{i,j} \right\} \end{split}$$
(4.12)

y, a partir de la ec. (2.22), llegamos a que el término ϵ_{ν} se escribe de la siguiente manera

$$\epsilon_{\nu} = \left(\hbar\omega + \frac{1}{2}\right) \left(\nu + \frac{1}{2}\right) - \frac{\chi}{4A} \left(N_0(N_0 - 2)\right). \tag{4.13}$$

Así, al sustituir estos resultados en la ec. (3.10) podemos calcular los valores de la energía.

En la figura 3.1 se graficaron sólamente los valores de energía múltiplos de $2\hbar\omega$, i. e. que se consideran excitaciones de dos nucleones.En la figura 3.2 se presenta el espectro de energía para el mismo sistema pero calculado mediante la diagonalización del modelo simpléctico. Es posible apreciar, a partir de las figura 3.1 y 3.2, que los resultados no concuerdan al ir hacia niveles de excitación más alto, esto se debe, posiblemente, a que existen mezclas entre los estados excitados con energías de $\hbar\omega$ y los estados con energías de $2\hbar\omega$.

La diferencia que se presenta en los resultados, también se se debe a que la expresión (3.2) que se utiliza para denotar los estados excitados tiene varios términos los cuales no tomanos en cuenta, es decir, que solamente estamos utilizando una expresión aproximada.

También hay que tomar en cuenta que los los estados $|\Psi\rangle$ son los estados que se obtiene mediante el método de Hartree-Fock, es decir, al llevar a cabo una variación de la energía del estado base. Pero en mestro caso solo tomanos una primera aproximación para estos estados.

Así, a partir de esto, es posible entender porque existen diferencias entre los resultados del modelo simpléctico y el método de Tamm-Dancoff, y como es posible mejorar los resultados que se obtienen mediante este último.



Figura 4.1: Variación de la diferencia entre la energía del estado base y, los primeros estados excitados con respecto a la interacción "cuadrupolar", para un sistema de 8 nucleones.





Capítulo 5

Modelo simpléctico para moléculas nucleares

5.1 Descripción y desarrollo histórico

La física de iones pesados se ha desarrollado rápidamente. Uno de los aspectos más sorprendentes de la física nuclear de iones pesados es la existencia y observación de estruturas cuasi-moleculares (17), las cuales, se dan a partir de las moléculas nucleares que se forman durante la colisión entre lones pesados. Una molécula nuclear es un sistema que consiste de dos núcleos unidos en su superficie en un potencial cuasi-molecular. Se producen en las colisiones cercanas de dos núcleos. Microscópicamente una molécula nuclear se entiende como una configuración en la cual los núcleones exteriores se mueven alrededor de ambos núcleos y constituyen un enlace similar a los enlaces covilentes que se presentan en las moléculas atómicas.

La configuración de las moléculas nucleares se manifiesta en la estructura resonante de las secciones transversales de los iones pesados. Las resonancias moleculares nos dan una evidencia experimental de que al interaccionar los núcleos, estos conservan su identidad durante la colisión y forman un enlace efectivo, el cual, puede rotar y vibrar como las moléculas atómicas, antes de que se separen por completo o que se unan para formar un solo núcleo.

En este capítulo trataremos de extender los resultados que se presentaron en el capítulo 1 a una molécula nuclear, es decir, trataremos de extender el hamiltoniano simpléctico a un sistema molecular de tal manera que este hamiltoniano sea igual al hamiltoniano dado en la ec. (1.17), cuando la distancia entre cúmulos sea igual a cero, i.e. que se considera un solo núcleo cuyo número total de nucleones es la suma de los nucleones de cada cúmulo. En este punto es importante determinar cómo puede considerarse el principio de Pauli en el modelo, ya que, a medida que disminuye la distancia entre los cúmulos, el número de cuantos no puede permanecer constante debido al principio de Pauli, por eso es importante determinar de qué manera se puede incluir esta propiedad dentro del modelo (aunque en realidad esto se hace de manera artificial ya que sólo tenemos una dimensión). En caso de que la distancia entre los dos cúmulos sea tal, que deja de existir cualquier tipo de interacción entre ellos entonces, el hamiltoniano es igual a la suma de dos hamiltonianos de la forma dada por la ec. (1.17).

5.2 Extensión del modelo simpléctico

Como se dijo el la sección anterior, debemos ampliar la teoría de tal manera que al separarse completamente los núcleos el modelo se aproxime a un sistema de dos núcleos independientes y, en el línite en el que la separación tiende a cero, el modelo debe aproximarse al de un solo núcleo. Como una posibilidad denotaremos cualquier operador O del álgebra simpléctica como la suma de tres operadores, el primero actuando sólo en el primer cúmulo, el segundo actuando sólo sobre el segundo cúmulo y finalmente una parte relativa que describe el movimiento relativo de los núcleos. La manera de hacer estos se describe en las refs. [18][19] y en el apéndice A. La expresión a la que llegamos es

$$O = O_1 + O_2 + O_r$$
 (5.1)

donde r se refiere al operador de la coordenada radial. De hecho, podemos relacionar ambos lados mediante una transformación ortogonal.

Cuando se considera un solo núcleo, ambos lados son multiplicados por la misma constante de interacción, sin embargo, en el caso de dos núcleos interaccionando, esto debe modificarse. Por ejemplo, si tenemos los operadores N y \mathbf{Q}^2 multiplicados por las constantes $\hbar\omega$ y χ respectivamente, proponemos la siguiente modificación, a partir de la expresión (4.1), para los nuevos operadores

$$\hbar\omega \mathbf{N} \rightarrow \hbar\omega_1(r)\mathbf{N}_1 + \hbar\omega_2(r)\mathbf{N}_2 + \hbar\omega_{12}(r)\mathbf{N}_r \qquad (5.2)$$

$$\chi \mathbf{Q}^2 \rightarrow \chi_1(r) \mathbf{Q}_1^2 + \chi_2(r) \mathbf{Q}_2^2 + \chi_{12}(r) \mathbf{Q}_r^2 + + 2\chi_{12}(r) (\mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_2 + \mathbf{Q}_1 \mathbf{Q}_r + \mathbf{Q}_2 \mathbf{Q}_r),$$
(5.3)

donde la r en los parámetros de interacción se refiere a un parámetro de distancia, es decir, que los parámetros de interacción son funciones de la dis-

34

tancia. El operador r se refiere al operador de distancia real. La sustitución anterior es simplemente una propuesta, la cual, cumple con los requisitos mencionados anteriormente, es decir, que para una distancia igual a cero entre los cúmulos, todos los parámetros de interacción son iguales a cero y, entonces los operadores serán iguales a aquéllos que corresponden al sistema unido. Cuando los núcleos están completamente separados los términos de interacción, $\hbar\omega_{12}$, y χ_{12} deben tender a cero; con lo cual la expresión (4.2) describe simplemente el comportamiento de dos núcleos independientes.

Ahora introduciremos un parámetro adiabático de distancia, r, de los dos cúmulos para poder ver cómo cambian los parámetros de interacción como función de r y, más tarde, veremos la relación que existe entre éste parámetro y el operador r.

Las condiciones para las distancias límite las podemos escribir como

$$\hbar\omega_{k}(r) = \begin{cases} \hbar\omega_{k,0} & \text{para } r > r_{sep} \\ \hbar\omega & \text{para } r=0 \end{cases}$$
$$\hbar\omega_{12}(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r > r_{sep} \\ \hbar\omega & \text{para } r=0 \end{cases}$$
$$\chi_{k}(r) = \begin{cases} \chi_{k,0} & \text{para } r > r_{sep} \\ \chi & \text{para } r=0 \end{cases}$$
$$\chi_{12}(r) = \begin{cases} 0 & \text{para } r > r_{sep} \\ \chi & \text{para } r=0 \end{cases}$$

Aquí el subíndice k=1,2 se utiliza para denotar cada uno de los cúmulos, el subíndice "0" se refiere al valor que se alcanza cuando los cúmulos no interaccionan, $r_{sep} = 1.2(A_1 + A_2)$ es la distancia a la cual deja de existir la interacción. Los parámetros que no tienen ningún subíndice se refieren a los valores que se obtienen cuando los dos cúmulos se "fusionan". Para los parámetros que describen la interacción entre los cúmulos, se proponen las siguientes expresiones:

$$\hbar\omega_{12}(r) = \frac{1}{2}(\hbar\omega_1(r) + \hbar\omega_2(r))g(r)$$
 (5.4)

$$\chi_{12}(r) = \frac{1}{2}(\chi_1(r) + \chi_2(r))g(r). \qquad (5.5)$$

,

Como se puede apreciar se tomó el promedio de los valores de los parámetros de cada cúmulo y la función g(r) depende de r (una posible elección se

presenta en la ref. [13]), de tal manera que va de l para r=0 a 0 para $r=r_{sep}$.

Para extrapolar la contribución proveniente del "trace equivalent part", es decir, de la parte $-N_nn$ de la ec. (2.16), proponemos la siguiente expresión:

$$-\chi_1 N_0 \mathbf{n}_1 - \chi_2 N_0 \mathbf{n}_2 - \chi_{12} \{ N_0 \mathbf{n} - N_{0,1} \mathbf{n}_1 - N_{0,2} \mathbf{n}_2 \}, \qquad (5.6)$$

donde $\mathbf{n} = \mathbf{n}_1 + \mathbf{n}_2 + \frac{N(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}}{2} y N_0$ representan el número total de cuantos excitados del sistema unido y el número de cuantos del estado base, más $\frac{A_1 + A_2 - 1}{2}$, respectivamente. Por construcción esto se aproxíma a un sistema de dos núcleos separados para distancias grandes y, a un núcleo para distancia cero.

A partir de las sustituciones anteriores obtenemos que el hamiltoniano, para la molécula nuclear, tiene la siguiente forma

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 + \mathbf{H}_2 + \mathbf{H}_{int} \tag{5.7}$$

donde los dos primeros términos tienen la misma forma que el hamiltoniano de la ec. (1.17), salvo que ahora se utiliza un subíndice k=1,2. El último término representa la interacción y su forma explícita es:

$$\mathbf{H}_{int} = \mathbf{H}_{1,2} + \mathbf{H}_{1,r} + \mathbf{H}_{2,r} + \mathbf{H}_{r} + \mathbf{H}_{TE}.$$
 (5.8)

El primer término describe la interacción entre los dos cúmulos, los siguientes dos términos describen la interacción del k-ésimo cúmulo con el movimiento relativo, el cuarto sumando se refiere al movimento puramente relativo y tiene la misma forma que \mathbf{H}_k pero ahora con subíndice r. Finalmente, el último términos de la contribución que no se puede asimilar en los dos primeros términos de la ec. (4.4) del "trace equivalent part".

La forma explícita de estos términos se da a continuación (con k=1,2)

$$\begin{split} \mathbf{H}_{1,2} &= -\chi_{12} \Biggl\{ \frac{1}{4} \Biggl(\mathbf{B}_{1}^{\dagger} \mathbf{B}_{2}^{\dagger} + \mathbf{B}_{1} \mathbf{B}_{2} \Biggr) + \frac{1}{4} \Biggl(\mathbf{B}_{1}^{\dagger} \mathbf{B}_{2} + \mathbf{B}_{2}^{\dagger} \mathbf{B}_{1} \Biggr) + \\ &+ \frac{1}{2} \Biggl(\mathbf{B}_{1}^{\dagger} \mathbf{N}_{2} + \mathbf{N}_{2} \mathbf{B}_{1} + \mathbf{B}_{2}^{\dagger} \mathbf{N}_{1} + \mathbf{N}_{1} \mathbf{B}_{2} \Biggr) + \mathbf{N}_{1} \mathbf{N}_{2} \Biggr\} \\ \mathbf{H}_{k,r} &= -\chi_{12} \Biggl\{ \frac{1}{4} \Biggl(\mathbf{B}_{k}^{\dagger} \mathbf{B}_{r}^{\dagger} + \mathbf{B}_{k} \mathbf{B}_{r} \Biggr) + \frac{1}{4} \Biggl(\mathbf{B}_{k}^{\dagger} \mathbf{B}_{r} + \mathbf{B}_{r}^{\dagger} \mathbf{B}_{k} \Biggr) + \\ &+ \frac{1}{2} \Biggl(\mathbf{B}_{k}^{\dagger} \mathbf{N}_{r} + \mathbf{N}_{r} \mathbf{B}_{k} + \mathbf{B}_{r}^{\dagger} \mathbf{N}_{k} + \mathbf{N}_{k} \mathbf{B}_{r} \Biggr) + \mathbf{N}_{k} \mathbf{N}_{r} \Biggr\} \\ \mathbf{H}_{TE} &= -\chi_{12} \Biggl\{ \mathbf{n} (\mathbf{N}_{0} + \mathbf{n} - 1) - \mathbf{n}_{1} (\mathbf{N}_{1,0} + \mathbf{n}_{1} - 1) - \mathbf{n}_{2} (\mathbf{N}_{2,0} + \mathbf{n}_{2} - 1). \end{split}$$

Los elementos de matriz se calculan de manera similar a como se hizo en la sección (1.3) y la única diferencia estriba en que ahora la base está dada por

$$|\Psi\rangle = |\mathbf{N}_1\rangle |\mathbf{N}_2\rangle |\mathbf{N}_r\rangle \tag{5.9}$$

considerando que los estados del movimiento relativo corresponden al oscilador armónico relativo en una dimensión.

Dentro de cada cúmulo la antisimetría está garantizada automáticamen te. Sin embargo, la antisimetría no se mantiene cuando se considera el sistema completo, la base que se presenta en la ec. (4.6) debe antisimetrizarse. A veces se supone que mientras el traslape de los dos cúmulos sea pequeño, como sucede en las moléculas nucleares, el principio de Pauli no se viola "de manera considerable" (nosotros trataremos de verificar qué tan aceptable es esa suposición); porque en la región de traslape los nucleones de ambos cúmulos ocupan solo unos cuantos estados y, por este motivo, se supone que el principio de Pauli no juega un papel importante. Para un traslape mayor, i.e. $r \rightarrow 0$ debemos imponer la condición de Wildermuth [19], la cual establece que el número total de cuantos (de los dos núcleos y del oscilador relativo) debe ser igual al número de cuantos de los estados de Pauli permitidos.

Así, aunque el principio de Pauli se viole, se supone que éste puede tomarse en cuenta haciendo una selección apropiada de la dependencia de los purámetros del modelo en función de la distancia relativa. Es por esto que lo que haremos a continuación será determinar cómo los parámetros básicos deben de comportarse en función de la distancia relativa r. Como primer paso seguiremos la discusión dada en la ref. [20] donde se determina qué dependencia tiene el parámetro $\hbar\omega$ de un núcleo con respecto al número de nucleones. Considerando el oscilador armónico su valor de espectación está dado por

$$\langle \mathbf{H}_{0} \rangle = m\omega^{2} \left\langle \sum_{s=1}^{\frac{4}{3}} x_{s}^{2} \right\rangle = m\omega^{2} A \langle x^{2} \rangle, \qquad (5.10)$$

donde $\langle x^2 \rangle$ representa el radio cuadrado medio y se calcula a partir de la siguiente expresión (la cual no toma en cuenta la deformación):

$$\langle x^2 \rangle = \frac{1}{A} \int dx \rho_0 x^2 = \frac{1}{3} R_0^2,$$
 (5.11)

donde $\rho_0 = \frac{A}{2R_0}$ es la densidad nuclear. Por otro lado la parte izquierda de la ec. (4.10) también puede calcularse de la siguiente manera

$$\langle \mathbf{H}_0 \rangle = \hbar \omega \langle \mathbf{N} \rangle = \hbar \omega \sum_{n=1}^{\frac{4}{2}} 2n = \hbar \omega 2 \frac{\frac{4}{2} \left(\frac{4}{2} + 1\right)}{2}$$

$$\langle \mathbf{H}_0 \rangle \approx \hbar \omega \left(\frac{A}{2}\right)^2.$$
 (5.12)

Aquí se ha supuesto que sólo tenemos un número par de partículas y que cada estado puede ser ocupado por dos partículas, una con espín arriba y otra con espín hacia abajo (es importante recalcar que en una dimensión no es posible hablar de espín). Comparando ambas ecuaciones llegamos a:

$$\hbar\omega = 21A^{-1}$$
 MeV. (5.13)

Tomando mc²=938 MeV, $\hbar c = 197 MeV$ -fm y $r_0 = 1.2$ fm, como sabemos esto difiere del caso tridimensional donde $\hbar \omega = 414^{-\frac{1}{2}}$. Con estos resultados, y tomando en cuenta el hecho de que el radio esférico de cada cúmulo es proporcional al número de nucleones A_k que contiene, obtenemos la a siguiente expressión

$$\hbar\omega_k = \left(\frac{R_{k,0}}{R_k}\right)\hbar\omega_{k,0}.$$
(5.14)

Aquí el índice "0" se refiere a el valor que se alcanza cuando deja de existir interacción $(R_{k,0} = 1.2(A_1 + A_2))$, R_k representa el radio equivalente que se tiene cuando los dos cúmulos se encuentran a una distancia r a la cual se traslapan. Su relación con la distancia relativa se puede determinar a partir de la conservación del volúmen. Cuando la separación es completa, la suma de los volúmenes de los cúmulos está dada por $2(R_{1,0} + R_{2,0})$. En el caso que se traslapen el volúmen se calcula a partir de la expresión $(R_1 + r + R_2)$ (ver figura 4.1).

Tomando en cuenta que R_k es proporcional a A_k tenemos:

$$R_{1} = 2R_{1,0} - \frac{rA_{1}}{A_{1} + A_{2}}$$

$$R_{2} = 2R_{2,0} - \frac{rA_{2}}{A_{1} + A_{2}}.$$
(5.15)

Para el caso simétrico las expresiónes anterioriores se reducen a:

$$R_1 = R_2 = 2R_0 - \frac{r}{2} \tag{5.16}$$

y, como se puede apreciar, las condiciones límite se satisfacen, ya que, para r=0 tenenos un radio dos veces mayor que el valor que se tiene a la distancia de separación ($r_{sep} = 2R_0$) y, para una distancia $r = R_1 + R_2 = 2R_0$ tenemos $R_k = R_0$. Como se ve, el radio aumenta conforme el traslape de los cúmulos se hace más pronunciado; la interpretación de este resultado

38



Figura 5.1: (a) separación completa entre los cúmulos, (b) traslape entre los cúmulos.

se da a partir del principio de Pauli, ya que, conforme la distancia entre cúmulos disminuye el principio de Pauli cobra mayor importancia haciendo que los nucleones se muevan a niveles más altos de energía y, con esto, aumenta el radio de cada cúmulo. Este hecho se refleja en un aumento de la energía, lo cual es posible apreciar al sumar las siguientes condiciones (vía los multiplicadores de Lagrange):

$$N_1 - N_1 = 0$$

$$N_2 - N_2 = 0$$
 (5.17)

$$N_r - N_r = 0.$$

.

En la ec. (4.17) las funciones $N_k \neq N_r$ expresan cómo cambia el número de cuantos en cada cúmulo, conforme disminuye la distancia entre ellos. Es importante notar que esta no es la condición de Wildernuth pero se aproxíma a ésta cuando r $\rightarrow 0$. La razón principal es que la condición de Wildermuth es válida en un oscilador común de los dos cúmulos, sin embargo, en este modelo usamos dos osciladores separados e independientes para cada cúmulo, más un oscilador relativo. Las condiciones dadas en la ec. (4.14) son difíciles de implementar en programa que calcula el espectro de energía. El número de cuantos de oscilación es proporcional [11] a $\omega_k A_k R_c^2$.



Figura 5.2: Variación del número de cuantos del k-ésimo cúmulo, con respecto a la distancia, para un sistema simétrico de 12 nucleones en cada cúmulo y con $\chi_{k,0} = 0.015$.

Esto se puede escribir como

$$N_{k}(r) = \left[\frac{\omega_{k}R_{k}R_{k}^{2}}{\omega_{k,0}R_{k,0}^{2}}\right]N_{k,0} = \frac{R_{k}}{R_{k,0}}N_{k,0}.$$
 (5.18)

De manera similar el número de cuantos del oscilador relativo varía con respecto a r, de la siguiente manera

$$N_{\mathbf{r}}(\mathbf{r}) = \left((\xi \mathbf{r})^2 + \frac{1}{2} \right) = \frac{mc^2}{2(\hbar c)^2} (\hbar \omega_{12}(\mathbf{r}))^2 \frac{A_1 A_2}{A_1 + A_2} \mathbf{r}^2 + \frac{1}{2}, \qquad (5.19)$$

donde

$$\xi = \sqrt{\frac{m\omega_{12}}{2\hbar}} \sqrt{\frac{A_1A_2}{A_1 + A_2}}.$$

A continuación presentamos (figs. 4.2 y 4.3) cómo varían $N_k(r)$ y $N_r(r)$ con respecto a r. Como se puede apreciar en la figura (4.2), para los dos cúmulos los cuantos de oscilación aumentan de manera monótona conforme



Figura 5.3: Variación del número de cuantos del oscilador relativo, con respecto a la distancia entre cúmulos para un sistema con 12 nucleones en cada cúmulo, con $\chi_{k,0} = 0.015$.

la distancia relativa tiende a cero. Por otro lado los cuantos del oscilador relativo alcanzan un máximo entre la distancia cero y la distancia de separación y tiende a cero para r=0 y para $r=r_{xe0}$ (ver figura (4.3)).

Sumando los valores de $N_{k}(r)$ y $N_{r}(r)$ a la energía del estado base podemos modelar de manera aproximada el efecto que tiene el principio de Pauli sobre el sistema molecular, es decir, hacer que para cierto valor de la distancia relativa los nucleones de cada cúmulo tiendan a estar en niveles de energía más altos.

Para los parámetros χ_k proponemos la siguiente dependencia

$$\chi_{k} = \left(\frac{R_{k,0}}{R}\right)^{2} \chi_{k,0}. \tag{5.20}$$

En la figura 4.4 se presenta como varían los parámetros χ_k , para un sistema simétrico, dados por la ec. (4.20). Como se puede apreciar para $r = r_{sep}$ tenemos $\chi_k = \chi_{k,0} = 0.015$ y, al disminuir la distancia, disminuye de manera uniforme el valor de χ_k . Para r=0 se obtiene un valor $\chi \approx 0.0038$



Figura 5.4: Variación de la interacción "cuadrupolar" del k-ésimo cúmulo, con respecto a la distancia relativa (para un sistema de 12 nucleones en cada cúmulo y $\chi_{k,0} = 0.015$).



Figura 5.5: Variación de la interacción "cuadrupolar" del término de interacción entre cúnulos, con respecto a la distancia relativa (para un sistema de 12 nucleones en cada cúmulo y $\chi_{k,0} = 0.015$).

que es el valor de la interacción "cuadrupolar" para el sistema unido, es decir cuando los dos cúmulos se han unido completamente.

De igual manera, en la figura (4.5) se presenta el cálculo para el parámetro x_{12} dado por la ec. (4.5).

A partir de la figura (4.4) se puede observar que el valor de χ_{12} tiende a cero si $r \rightarrow r_{sep}$ y aumenta conforme la distancia relativa tiende a 0.

Finalmente se presenta la variación de los parámetros $\hbar\omega_k$ (ver figura 4.6) y $\hbar\omega_{12}$ (ver figura 4.7) dados por las ecs. (4.14) y (4.4) respectivamente.

En base a estos resultados, en la figura 4.8 se presenta un cálculo de la energía del estado base de la molécula nuclear, en un caso donde se consideran 12 nucleones en cada cúmilo y $\chi_{k,0} = 0.015$. La forma explícita de la función g(r), que se presenta en las ecs. (4.4) y (4.5), se toma como $g(r) = 1 - \frac{r}{r_{err}}$ con $r_{err} = r_0(A_1 + A_2)$. Con esto los valores para los parámetros varian con la distancia relativa r, esta variación se presenta en las figuras 4.1-4.4. En esta última se presenta la variación de $\hbar\omega_{12}$.

Como se puede apreciar en la figura 4.8 la energía del estado base disminuye hasta alcanzar un mínimo para $r \approx r_{rep}$, lo cuál, se debe a la



Figura 5.6: Variación del término $\hbar\omega_{k_1}$ con respecto a la distancia relativa (para un sistema de 12 nucleones en cada cúmulo y $\chi_{k,0} = 0.015$).



Figura 5.7: Variación del parametro $\hbar\omega_{12}$, con respecto a la distancia relativa (para un sistema de 12 nucleones en cada cúmulo y $\chi_{k,0} = 0.015$).



Figura 5.8: Variación de la energía del estado base, para un sistema de dos cúmulos con 12 nucleones cada uno y $\chi_{k,0} = 0.015$, con respecto a la distancia relativa entre ellos.



Figura 5.9: Niveles de energía , con $A_k = 12$ y $\chi_{k,0} = 0.015$.

atracción producida por la interacción cuadrupolar. Conforme disminuye la distancia relativa, la energía aumenta nuevamente debido a que parte de los nucleones empiezan a subir a niveles de energía más altos, ya que el principio de Pauli les impide permanecer en nivel de energía bajos. La energía alcanza un valor máximo en el cual todos nucleones ya ocupan estados de energía de manera que se satisface el principio de Pauli. A partir de este punto la energía disminuye debido a la atracción nuclear. Finalmente en la figura 4.9 se presenta el espectro completo con respecto del estado base. 6

Conclusiones

El objetivo de esta tesis fue dar una aproximación microscópica al problema de una molécula nuclear. Para esto se simplificó el problema utilizando el modelo simpléctico en una dimensión, ya que, todas las ideas básicas de un modelo más realista, es decir, un modelo tri-dimensional, se pueden explicar a partir de este sencillo modelo.

Como primer punto se discutió el modelo simpléctico de un núcleo. Se presentó un hamiltoniano y se mostró que este hamiltoniano es una función de los generadores del grupos simpléctico. Debido a esto fue posible utilizar las técnicas de la teoría de grupos para los elementos de matriz y así poder diagonalizar el hamiltoniano, i.e. obtener los niveles de energía del sistema. También fue posible determinar que, a partir de cierto valor de χ , el sistema present variaciones bastante marcadas , i.e. que el estado base disminuye su energía de un mayor número de cuantos excitados a la configuración del estado base.

Como segundo punto se considera el modelo simpléctico contraído. Como se pudo apreciar, los cambios que existen entre este modelo y el modelo simpléctico no son cambios inportante y, básicamente, los espectros de energía de ambos modelos son muy parecidos. Sin embargo, es importante conocer este modelo porque al considerar el caso tri-dimensional los cálculos del modelo simpléctico se hacen extremadamente complicados y, con el modelo contraído, estos cálculos se simplifican considerablemente.

Posteriormente se consideró el método de Hartree-Fock para aproximar la energía del estado base de un núcleo. Se determinó que la energía, calculada con el método de Hartree-Fock, disminuye de manera lineal comforme aumenta la interacción "cuadrupolar". Además, fue posible observar que, a partir de cierto valor, los resultados que se obtienen mediante este método difieren considerablemente de los que se obtienen mediante el modelo simpléctico.

Para calcular la energía de los estados excitados se utilizó, como una alternativa, el llamado método de Tamm-Dankoff, los resultados muestran que para $\chi = 0$ los valores para la energía concuerdan con los que se obtienen mediante el modelo simpléctico. Pero para valores de χ diferentes de cero el método de Tamm-Dankoff muestra que la energía para cada uno de los niveles excitados disminuye de manera lineal, pero esto no concuerda con los resultados del modelo simpléctico que muestran que conforme aumenta el valor de χ , en general, la energía también tiende a aumentar.

Como último paso se extendió el modelo a una molécula nuclear. Esta extensión fue directa. Primero se propone un hamiltoniano el cual satisface las siguientes condiciones de frontera: 1) cuando r tiende a cero, el hamiltoniano toma la forma del hamiltoniano del sistema unido; y 2) para r mayor que la distancia de interacción entre los cúmulos el hamiltoniano se escribe como la suma de dos hamiltonianos independientes. También se logró implementar el principio de Pauli de manera aproximada en este modelo.

Se muestra que el número de cuantos de cada cúmulo aumenta conforme disminuye la distancia entre los cúmulos, mientras que para el oscilador relativo, el número de cuantos aumenta hasta cierto valor y después disminuye a cero para r=0. A partir de esto los resultados muestran que la energía del estado base presenta un mínino que se encuentra a una distancia cercana a la distancia de separación. Y que a partir de este punto la energía aumenta debido al principio de Pauli. Este resultado concuerda con lo esperado ya que muestra que existe un estado en el que ambos cúmulos interactúan como una molécula.

Con esto podemos concluir que el modelo simpléctico es bastante bueno para describir el comportamiento de un núcleo y de una molécula nuclear.

Hasta ahora el modelo en tres dimensiones sólamente se ha utilizado para deducir potenciales geométricos [13]. Sin embargo, es posible hacer el estudio microscópico en tres dimensiones de una molécula nuclear y, el estudio uni-dimensional que se ha presentado aquí sirve para entender los pasos esenciales que se deben seguir para realizar este estudio.



Apéndice A Coordenadas de Jacobi

Definimos las variable de posición de los nucleones, x'_s , donde s denota el número de nucleones (s=1...,A). Desde un inicio extraemos la dimensión $\sqrt{\frac{1}{m_{wig}}}$, así, las variables x'_s son adimensionales. Para extraer el centro de masa se introducen las variable de Jacobi [9]. Una posibilidad es

$$\sqrt{\frac{h}{m\omega_{12}}} x_s = \sqrt{\frac{s}{s+1}} \left(\frac{1}{s} \sum_{t=1}^{s} x'_t - x'_{s+1} \right)$$

$$\sqrt{\frac{h}{m\omega_{12}}} x_A = \frac{1}{\sqrt{A}} \sum_{t=1}^{A} x'_t$$
(A.1)

donde x_x y x_A son las coordenadas de Jacobi, las cuales son adimensionales. El mapeo de x'_x a x_x y x_A es una transformación ortogonal.

Cuando se consideran dos cúmulos, primero dividimos x'_s en dos conjuntos los cuales describen $A_1 \neq A_2$ nucleones x'_s $(s = 1, \ldots, A_1 - 1)$) respectivamente, es decir, x'_s $(s = 1, \ldots, A_1 - 1)$, x'_{A_2} además dentro de cada cúmulo ya se ha hecho la transformación a coordenadas de Jacobi. Como siguiente paso se aplica una transformación ortogonal a x'_{A_1} , x'_{A_2} , ambas proporcionales a las coordenadas del centro de masa de cada cúmulo, así, tenemos (con $A \simeq A_1 + A_2$)

$$\begin{pmatrix} \sqrt{\frac{A_1+A_2}{A_1+A_2}} \\ \sqrt{A_1} \\ \sqrt{A}r_{cm} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{A_1}{A}} & -\sqrt{\frac{A_1}{A}} \\ \sqrt{\frac{A_1}{A}} & \sqrt{\frac{A_2}{A}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{A}{m\omega_1}} x_{A_1}^1 \\ \sqrt{\frac{A}{m\omega_2}} x_{A_2}^2 \end{pmatrix},$$

ahora

$$\mathbf{r} = \sqrt{\frac{A_1 + A_2}{A_1 A_2}} \left\{ \sqrt{\frac{A_2}{A}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_1}} x_{A_1}^1 - \sqrt{\frac{A_1}{A}} \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_2}} x_{A_2}^2 \right\}$$
(A.2)

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_{12}}} \left(\frac{1}{A_1} \sum_{\sigma=1}^{A_1} \sqrt{\frac{\omega_{12}}{\omega_1}} x_{\sigma}^1 - \frac{1}{A_2} \sum_{\sigma=1}^{A_1} \sqrt{\frac{\omega_{12}}{\omega_2}} x_{\sigma}^2 \right)$$
(A.3)

evidentemente representa el vector de distancia relativa y

$$\mathbf{r}_{cm} = \frac{1}{A} \left(\sum_{s=1}^{A_1} \tilde{x}_s^1 + \sum_{s=1}^{A_2} \tilde{x}_s^2 \right). \tag{A.4}$$

en el centro de masa, con $\bar{x}^i_s = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_i}} x^i_s$.

_

Cuando se considera un solo núcleo los generadores del grupo Sp(2, R)pueden escribirse en términos de las coordenadas y los momentos, o en términos de los operadores bosónicos de creación y aniquilación (ver ecs. (1.11) y (1.12)). Aplicando la transformación ortogonal de coordenadas de manera sucesiva, dentro de cada cúmulo, luego, aplicando la ec. (6.4), y denotando con O a los generadores, llegamos a:

$$\mathbf{O} = \mathbf{O}_1 + \mathbf{O}_2 + \mathbf{O}_r. \tag{A.5}$$

Con esto hemos logrado separar a los generadores en términos que actúan sólamente en las coordenadas de cada cúmulo y en su coordenada relativa. Además, es importante notar que r es la diferencia de los vectores de centro de masa de cada cúmulo.

Apéndice B

Cálculo de la norma del estado $|N\rangle$

Lo que intentamos determinar es el valor explícito de la siguiente expresión

$$\langle N_0 | (\mathbf{B})^n (\mathbf{B}^{\dagger})^n | N_0 \rangle. \tag{B.1}$$

Primero determinamos el siguiente conmutador

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B}, (\mathbf{B}^{\dagger})^{n} \end{bmatrix} = \sum_{k=1}^{n-1} (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1-k} [\mathbf{B}, \mathbf{B}^{\dagger}] (\mathbf{B}^{\dagger})^{k} \\ = \sum_{k=1}^{n-1} (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1-k} (4\mathbf{N}) (\mathbf{B}^{\dagger})^{k} \\ = 4 \sum_{k=1}^{n-1} (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1-k} (\mathbf{B}^{\dagger})^{k} (\mathbf{N}+2k) \\ = 4 \sum_{k=1}^{n-1} (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1} (\mathbf{N}+2k) \\ = 4 (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1} \sum_{k=1}^{n-1} (\mathbf{N}+2k) \\ = 4 (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1} \left(n\mathbf{N}+2\frac{n(n-1)}{2}\right) \\ \begin{bmatrix} \mathbf{B}, (\mathbf{B}^{\dagger})^{n} \end{bmatrix} = 4 (\mathbf{B}^{\dagger})^{n-1} n(\mathbf{N}+n-1)$$
(B.2)

en la deducción anterior utilizamos el hecho de que $[\mathbf{B}, \mathbf{B}^{\dagger}] = 4\mathbf{N}$ y además que $\mathbf{N}\mathbf{B}^{\dagger}|N\rangle = (N+2)|N+2\rangle$. Usando ésta expresión recursivamente obtenemos

$$\langle N_0 | (\mathbf{B})^n (\mathbf{B}^{\dagger})^n | N_0 \rangle = 4^n n! \frac{(N_0 + n - 1)!}{(N_0 - 1)!}.$$
 (B.3)

Por otro lado tenemos que $4\mathbf{N}|N_0\rangle = N_0|N_0\rangle$ y, además, $\langle N_0|N_0\rangle = 1$. Por medio de estos resultados finalmente llegamos a que el factor de normalización es

$$\hat{N}_{N_0,n} = \sqrt{\frac{(N_0 - 1)!}{4^n n! (N_0 + n - 1)!}}.$$
(B.4)

Mediante la expresión anterior es posible determinar los factores de normalización que se utilizaron anteriormente

$$\frac{\hat{N}_{N_0,n}}{\hat{N}_{N_0,n-2}} = \sqrt{\frac{1}{4^2 n (n-1)(N_0+n-1)(N_0+n-2)}}$$
$$\frac{\hat{N}_{N_0,n-1}}{\hat{N}_{N_0,n-1}} = \sqrt{\frac{1}{4n(N_0+n-1)}}$$
$$\frac{\hat{N}_{N_0,n-1}}{\hat{N}_{N_0,n+1}} = \sqrt{4n(n+1)(N_0+n)}$$
$$\frac{\hat{N}_{N_0,n+1}}{\hat{N}_{N_0,n+2}} = \sqrt{4^2(n+1)(n+2)(N_0+n)(N_0+n+1)}$$

Apéndice C

Segunda cuantización

C.1 Operadores de creación y aniquilación

El nombre " segunda cuantización' puede prestarse a confusiones, ya que, no se refiere a una nueva cuantización de la mecánica cuántica, sino que sólamente se refiere a una formulación alternativa de la mecánica cuántica usual. Esta segunda cuantización puede usarse tanto para fermiones como para bosones. En esta parte daremos una pequeña introducción a las ideas básicas de la segunda cuantización.

Empezanos tomando un conjunto completo de estados ortogonales, $|\nu\rangle$, de una partícula (donde ν representa un conjunto de números cuánticos). Es esta sección nos enfocaremos a sistemas fermiónicos y denotaremos los operadores de creación y aniquilación como a_{τ}^{+}, a_{ν} respectivamente. Debido a que en el caso fermiónico los diferentes estados sólo pueden tener una partícula o estar vacios (por el principio de exclusión de Pauli) podemos definir la acción de estos operadores sobre el estado de un sistema de varias partículas como

$$a_{\nu}|n_1, \dots, n_{\nu} = 1, \dots \rangle = |n_1, \dots, n_{\nu} = 0, \dots \rangle$$

 $a_{\nu}|n_1, \dots, n_{\nu} = 0, \dots \rangle = 0$ (C.1)

De igual manera, para el operador de creación obtenemos

$$\begin{aligned} a_{\nu}^{+}|n_{1},\ldots,n_{\nu}=0,\ldots\rangle &= |n_{1},\ldots,n_{\nu}=1,\ldots\rangle \\ a_{\nu}^{+}|n_{1},\ldots,n_{\nu}=1,\ldots\rangle &= 0 \end{aligned} \tag{C.2}$$

Bajo estas restricciones, obtenemos

$$\{a_{\mu}, a_{\nu}^{+}\} = a_{\mu}a_{\nu}^{+} + a_{\nu}^{+}a_{\mu} = \delta_{\mu\nu}$$
(C.3)

$$\{a_{\mu}, a_{\nu}\} = \{a_{\mu}^{+}, a_{\nu}^{+}\} = 0$$
 (C.4)

C.2 Operadores de campo en el espacio de coordenadas

Usando funciones de onda de una partícula $\varphi_{\nu}(\vec{r}_1, s_1) = \langle \vec{r}_1, s_1 | \nu \rangle$, podemos expresar los operadores de creación y aniquilación a partir de las coordenadas \vec{r} y s

$$a(\vec{r},s) = \sum_{\nu} \varphi_{\nu}(\vec{r},s) a_{\nu}$$

$$a^{+}(\vec{r},s) = \sum_{\nu} \varphi_{\nu}^{*}(\vec{r},s) a_{\nu}^{+}.$$
(C.5)

Podemos invertir estas relaciones a partir de las condiciones de completez y de ortogonalidad y, llegamos a

$$a_{\nu} = \sum_{s} \int d^{3}r \varphi_{\nu}^{*}(\vec{r},s) a(\vec{r},s)$$

$$a_{\nu}^{+} = \sum_{s} \int d^{3}r \varphi_{\nu}(\vec{r},s) a^{+}(\vec{r},s)$$
(C.6)

y, por supuesto, las reglas de conmutación son

$$\{a(\vec{r},s), a^+(\vec{r}',s') = \delta_{ss'}\delta(\vec{r}-\vec{r}')$$
(C.7)

$$\{a(\vec{r},s), a(\vec{r}',s')\} = 0$$
 (C.8)

Así, una función de onda Ψ para un sistema de varios fermiones la podemos escribir como

$$\Psi_{\{n_{\nu}\}}(1,\ldots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle -|a(N)\ldots a(1)|n_1,n_2\ldots,n_{\nu},\ldots \rangle$$
 (C.9)

У

$$|n_1, n_2 \dots, n_{\nu}, \dots\rangle = \int d1 \dots dN \frac{1}{\sqrt{N!}} \Psi_{\{n_{\nu}\}}(1, \dots, N) a^+(1) \dots a^+(N) |-\rangle$$
(C.10)

C.3 Representación de operadores

Comenzando a partir del vacío podemos expresar todos los estados en el espacio de Hilbert de mucho cuerpos, por medio de los operadores de creación y aniquilación y, en general, podemos hacer lo mismo para los operadores de la siguiente manera. Primero debemos distinguir entre los operadores que actúan sobre un solo cuerpo y aquellos que actúan sobre dos cuerpos.

Un operador de un solo cuerpo, como puede ser la energía cinética, o el momento total de un sistema de n-partículas, está dado como la suma de N operadores f_i , i.e.

$$\hat{F} = \sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i,$$
 (C.11)

los cuales actúan únicamente sobre las coordenadas de la i-ésima partícula. Sus elementos de matriz en la representación de $|\nu\rangle$ son $f_{\nu\nu'} = \langle \nu | \hat{f} | \nu' \rangle$. Esto es

$$\hat{f}_{i}\varphi_{\nu}(i) = \sum_{\nu'} f_{\nu\nu'}\varphi_{\nu'}(i).$$
(C.12)

La representación de \hat{F} por medio de los operadores de creación y aniquilación es

$$\hat{F} = \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} a^+_{\nu} a_{\nu'}$$
(C.13)

para poder decir que la relación anterior es correcta debemos demostrar que

$$\sum_{i} \hat{f}_{i} \Psi(1, \dots, N) = \langle 1, \dots, N | \sum_{\nu\nu'} f_{\nu\nu'} a_{\nu}^{+} a_{\nu'} | \Psi \rangle.$$
 (C.14)

A partir del lado izquierdo de las ecs. (8.12),(8.13) y (8.14), hasta un factor de $\frac{1}{\sqrt{N_1}}$, tenemos que

$$\sum_{i} \hat{f}_{i} \langle -|a(N) \dots a(i) \dots a(i)|\Psi \rangle =$$

$$= \sum_{i} \sum_{\nu_{1} \dots \nu_{N}} \hat{f}_{i} \varphi_{\nu_{N}}(N) \dots \varphi_{\nu_{i}}(i) \dots \varphi_{\nu_{1}}(1) \dots \langle -|a_{\nu_{N}} \dots a_{\nu_{1}}|\Psi \rangle$$

$$= \sum_{i} \sum_{\nu} \sum_{\nu_{1} \dots \nu_{N}} f_{\nu\nu_{i}} \varphi_{\nu_{N}}(N) \dots \varphi_{\nu_{i}}(i) \dots \varphi_{\nu_{1}}(1) \langle -|a_{\nu_{N}} \dots a_{\nu_{i}}|\Psi \rangle$$

Esto es idéntico al lado derecho:

$$\sum_{\nu\nu'} \sum_{\nu_{1}\ldots\nu_{N}} f_{\nu_{1}\nu}\varphi_{\nu_{N}}(N)\ldots\varphi_{\nu_{1}}(1)\langle -|a_{\nu_{N}}\ldots a_{\nu_{1}}a_{\nu}^{+}a_{\nu'}|\Psi\rangle$$

$$=\sum_{i} \sum_{\nu} \sum_{\nu_{1}\ldots\nu_{N}} f_{\nu_{i}\nu}\varphi_{\nu_{N}}(N)\ldots\varphi_{\nu_{1}}(1)\langle -|a_{\nu_{N}}\ldots a_{\nu}\ldots a_{\nu_{1}}|\Psi\rangle$$

C.4 Aplicación de la segunda cuantización

Ahora aplicaremos los resultados anteriores al siguiente operador hamiltoniano

$$\mathbf{H} = \hbar\omega \mathbf{N} - \frac{\chi}{2} \left\{ \frac{1}{4} [(\mathbf{B}^{\dagger})^{2} + (\mathbf{B})^{2})] + \frac{1}{2} \mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{B} + [\mathbf{B}^{\dagger} \mathbf{N} + \mathbf{N} \mathbf{B}] + (\mathbf{B}^{\dagger} + \mathbf{B}) - 2\mathbf{n} (\mathbf{N}_{0} + \mathbf{n} - 1) \right\}.$$
 (C.15)

A continuación expresamos los operadores \mathbf{B}^{\dagger} , \mathbf{B} y \mathbf{N} en la forma dada por la ec. (7.14). Para esto debemos calcular los elementos de matriz de los operadores de una partícula, así que tenemos:

$$\mathbf{B}^{\dagger} = \sum_{n',n} \langle n' | (\mathbf{b})^2 | n \rangle a_{n'}^{\dagger} a_n \tag{C.16}$$

donde los elementos de matriz se calculan a partir del hecho de que un estado $|n\rangle$ se puede expresar como $\frac{1}{\sqrt{n!}}(\mathbf{b})^n|-\rangle$, lo cual, nos lleva a que los elementos de matriz los podemos expresar como

$$\begin{aligned} \langle n'|(\mathbf{b})^2|n\rangle &= \frac{1}{\sqrt{n'|n|}} \langle -|(\mathbf{b})^{n'}(\mathbf{b}^{\dagger})^2 \mathbf{b}^{\dagger})^n|-\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{n'|n|}} \langle -|(\mathbf{b})^{n'}(\mathbf{b}^{\dagger})^{n+2}|-\rangle \\ &= \sqrt{(n+1)(n+2)} \langle n'|n+2\rangle \\ &= \sqrt{(n+1)(n+2)} \delta_{n',n+2} \end{aligned}$$

sustituyendo en la ec. (7.17) tenemos

$$B^{\dagger} = \sum_{m,m'} \sqrt{(m+1)(m'+2)} \delta_{m',m+2} a_{m'}^{\dagger} a_{m}$$

$$B^{\dagger} = \sum_{m,m'} \sqrt{(m+1)(m'+2)} a_{m+2}^{\dagger} a_{m}.$$
 (C.17)

De igual manera podemos calcular B y N y obtener

$$\mathbf{B} = \sum_{m} \sqrt{(m+1)(m+2)} a_{m}^{+} a_{m+2}$$
(C.18)

$$\mathbf{N} = \sum_{m} \left(m + \frac{1}{2} \right) a_m^+ a_m. \tag{C.19}$$

A partir de estas expresiones podemos escribir los demás operadores que aparecen en la ec. (8.15) como

$$(\mathbf{B}^{\dagger})^{2} = \sum_{m'm} \sqrt{(m'+1)(m'+2)} \sqrt{(m+1)(m+2)} a^{+}_{m'+2} a_{m'} a^{+}_{m+2} a_{m}.$$
(C.20)

Utilizando los resultados de la ec. (7.7) escribimos la expresión anterior

$$(\mathbf{B}^{\dagger})^{2} = \sum_{m'm} \sqrt{(m'+1)(m'+2)} \sqrt{(m+1)(m+2)} a_{m'+2}^{+} (\delta_{m'm+2} - a_{m+2}^{+} a_{m'}) a_{m}$$

$$(\mathbf{B}^{\dagger})^{2} = \sum_{m} \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)} a_{m+4}^{+} a_{m} - \sum_{m'm} \sqrt{(m'+1)(m'+2)} \sqrt{(m+1)(m+2)} a_{m'+2}^{+} a_{m+2}^{+} a_{m'} a_{m}$$

de la misma forma obtenemos las expresiones para los operadores restantes

$$(\mathbf{B})^2 = \sum_{m} \sqrt{(m+1)(m+2)(m+3)(m+4)} a_m^+ a_{m+4} - \\ -\sum_{m'm} \sqrt{(m'+1)(m'+2)(m+1)(m+2)} a_{m'}^+ a_m^+ a_{m'+2} a_{m+2} \\ \mathbf{B}^\dagger \mathbf{B} = \sum_{m} (m+1)(m+2) a_{m+2}^+ a_{m+2} - \\ -\sum_{m'm} \sqrt{(m'+1)(m'+2)(m+1)(m+2)} a_{m'+2}^+ a_m^+ a_{m'} a_{m+2} \\ \mathbf{N}^2 = \sum_{m'} \left(m + \frac{1}{2}\right) a_m^+ a_m - \sum_{m'm} \left(m' + \frac{1}{2}\right) \left(m + \frac{1}{2}\right) a_m^+ a_m^+ a_{m'} a_m \\ \mathbf{B}^\dagger \mathbf{N} = \sum_{m} \left(m + \frac{1}{2}\right) \sqrt{(m+1)(m+2)} a_{m+2}^+ a_m - \\ -\sum_{m'm} \left(m + \frac{1}{2}\right) \sqrt{(m'+1)(m'+2)} a_{m'+2}^+ a_m^+ a_{m'} a_m \\ \mathbf{NB} = \sum_{m} \left(m + \frac{1}{2}\right) \sqrt{(m+1)(m+2)} a_m^+ a_{m}^+ a_{m'} a_{m+2} \\ -\sum_{m'm} \left(m + \frac{1}{2}\right) \sqrt{(m+1)(m+2)} a_m^+ a_m^+ a_{m'} a_{m+2} \\ \end{array}$$

y N_0 es simplemente un escalar.

Referencias

- [1] Chadwick, J., Proc. Roy. Soc. London, A 136, 692 (1932).
- [2] Heisenberg, W., Z. Physik, 77, 1 (1932).
- [3] Ivanenko, D., Nature, 129, 798 (1932).
- [4] Mayer, M.G., Phys. Rev., 75, 1969 (1949).
- [5] Rainwater, J., Phys. Rev., 79, 432 (1950)
- [6] Elliott, J.P., Roy. Soc. London A 245, 128, 562 (1958).
- [7] Hecht, K.T., Adler, A., Nucl. Phys. A 137,129 (1959); Arima, A., Harvey, M., Shimizu, K., Phys. Lett. B 30, 517 (1969).
- [8] Rowe, D.J., Rep. Prog. Phys. A 491, 349 (1989).
- [9] Castaños, O., Draayer, J.P., Nucl. Phys. A 491, 349 (1989).
- [10] Castaños, O., Hess, P.O., Draayer, J.P., Rochford, P., Nucl. Phys. A 524, 469 (1991); Troltenier, D., Draayer, J.P., Hess, P.O., Castaños, O., Nucl. Phys. A 576, 351 (1994).
- [11] Latin-American school of Physics (AIP press, New York, 1996).
- [12] Moshinsky, M., Quesne, C., J. Math. Phys. 11, 1631 (1970).
- [13] Hess, P. O., Schmidt, J., Scheid, W., Ann. Phys. (N.Y.) 240, 22 (1995).
- [14] F. Arickx, J. Broeckhove, J. Deumens, Nucl. Phys. A 318, 269 (1979).
- [15] Gilmore, R., Lie Groups, Lie Algebras and some of their Aplications, (Wiley, New York, 1974).

- [16] Castaños, O., Hess, P.O., Draayer, J.P., Rochford, P., Phys. Lett. B 277, 27 (1992); Troltenier, D., Maruhn, J.A., Greiner, W., Hess, P.O., Zeit. f. Phys. A 343, 27 (1992); Geel, H.V., Hess, P.O., Troltenier, D., Maruhn, J.A., Greiner, W., Nucl. Phys. A 577, 605 (1994).
- [17] Bromley, D.A., Kuehner, J.A., Almqvist, E., Phys. Rev. Lett., 4, 365 (1960).
- [18] Hecht, K.T., Reske, E.J., Seligman, T.H., Zahn, W., Nucl. Phys. A 356, 146 (1981); Hecht, K.T., Hoffman, H.M., Zahn, W., Phys. Lett. B, 103, 92 (1981).
- [19] Wildermuth, K., Yang, Y.C., A unified theory of the nucleus, (Academic press, New York, 1977).
- [20] Eisenberg, J.M., Greiner, W., Nuclear Theory I:Nuclear Models, 3rd edition (North-Holland, Amsterdam, 1987).