

MÁSTER INTERUNIVERSITARIO EN FÍSICA NUCLEAR

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA



TRABAJO DE FIN DE MÁSTER

Cálculo de elementos de matriz a dos cuerpos y aplicaciones en estructura nuclear.

Autor:

Miguel
de la Fuente Escribano

Tutor:

Tomás Raúl
Rodríguez Frutos

Madrid, Agosto 2018

Índice

1. Prólogo	3
I Evaluación de elementos de matriz a dos cuerpos.	4
2. Introducción al problema nuclear	4
2.1. Naturaleza de la fuerza nuclear y tipos de interacciones nucleares.	4
2.2. Funciones de onda monoparticulares.	6
3. Fuerzas centrales e intercambio de espín e isospín	7
3.1. Descomposición multipolar de una interacción central general.	8
3.2. El método de las integrales de Talmi y la transformación de Brody-Moshinsky	10
3.2.1. Relaciones de recurrencia	10
3.2.2. Elementos de matriz para una fuerza central.	11
3.2.3. Las Integrales de Talmi	11
3.3. Interacción de Brink-Boeker	11
4. Fuerzas no centrales	13
4.1. Interacción de acoplamiento espín-órbita	13
4.2. Potencial Tensor	14
5. Interacciones esquemáticas, los elementos de matriz de la Surface Delta Interaction (SDI)	15
5.1. Modified Surface Delta Interaction (MSDI)	16
6. Elementos de matriz asociados con un espacio de valencia	17
II Aplicación de los elementos de matriz en cálculos de estructura nuclear.	18
7. Los métodos de campo medio	18
7.1. El Método Hartree-Fock-Bogolyubov	18
7.1.1. La Transformación de Bogolyubov, la matriz densidad y tensor de apareamiento	19
7.1.2. Las ecuaciones de HFB	19
7.2. Ruptura y Restauración de las simetrías	20
7.3. Método de Proyección al número de partículas, Variación tras la proyección (PNVAP).	21
7.4. Código Taurus PN-VAP.	22
8. Mezcla de configuraciones, la diagonalización directa	23
8.1. Código Antoine.	23
9. Aplicación de los elementos de matriz a dos cuerpos en cálculos de estructura.	25
9.1. Espectroscopía de núcleos con dos partículas o dos huecos en el espacio de valencia	26
9.1.1. Espectros en la capa P.	26
9.1.2. Espectros en la capa SD.	26
9.1.3. Reproducción del efecto del apareamiento, niveles del ^{210}Pb	29
9.2. Evolución de la energía del nivel fundamental a lo largo del llenado de la capa SD y PF.	29
9.2.1. Cadena de isótopos del Magnesio, capa SD	30
9.2.2. Cadenas de isótopos en la capa PF	30
9.2.3. Corrección de la sobreestimación de la energía de ligadura por la interacción SDI en la capa PF. Aplicación de la interacción MSDI	32
10. Resumen y Conclusiones	33
III Anexo y Referencias	34
A. Relaciones de recurrencia de los paréntesis de Brody-Moshinsky y elemento $n_1=n_2=0$	34
B. Obtención del elemento de matriz reducido $\langle n, l V(r) n', l' \rangle$ por medio de las Integrales de Talmi	35
Referencias	36

1. Prólogo

Los temas discutidos en este trabajo son la obtención de elementos de matriz a dos cuerpos de diferentes tipos de interacción nuclear, así como la descripción de los métodos que permiten realizar simulaciones de dichos elementos para casos concretos en núcleos.

Las interacciones que he tratado consisten en casos prácticos y sencillos, pero la forma de evaluarlos es general y eso nos permitirá en el futuro estudiar otras interacciones más avanzadas. Su obtención la he implementado con un programa que he escrito en C++. Los métodos que se enunciaran omitirán en muchos casos demostraciones para evitar que el contenido de la memoria sea excesivo y muchos de ellos se adjuntarán complementariamente en el Anexo.

En la segunda parte del trabajo se presentan los códigos de física nuclear en los que introduciré los elementos de interacción a dos cuerpos: el programa *Antoine*, basado en el modelo de capas con interacción para obtener una solución exacta; y el código *Taurus*, que obtiene una solución aproximada por el método Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB).

Finalmente, contrasto mis elementos de matriz con resultados obtenidos en la literatura y también con valores experimentales.

Por tanto, los principales objetivos conseguidos en el trabajo son:

- Adquirir los conocimientos teóricos necesarios para la obtención de los elementos de matriz de interacción a dos cuerpos.
- Aplicar los procedimientos teóricos por medio de un programa diseñado para su obtención y además, en un formato de entrada adecuado para los códigos nucleares.
- El manejo y uso de los códigos *Antoine* [29] [30] [31] y *Taurus* [23].
- La comparación con casos sencillos para testear los elementos de matriz obtenidos, así como la extensión de resultados a casos que no aparecen en la literatura y con las información experimental.

Parte I

Evaluación de elementos de matriz a dos cuerpos.

2. Introducción al problema nuclear

Los modelos de estructura nuclear son en esencia sistemas de muchos cuerpos (*many body*) de protones y neutrones que interactúan por medio de la fuerza nuclear fuerte. El presente trabajo consiste en la obtención de dicha interacción en casos simplificados, con los cuales poder realizar simulaciones para obtener las características observadas de determinados núcleos.

La forma en la que interactúan los nucleones puede plantearse de diferentes formas, los potenciales efectivos son una opción, son frecuentes en muchas simulaciones y tienen importantes implicaciones físicas. La evaluación teórica de estos elementos de interacción constituye la primera parte del trabajo. Los métodos de obtención que desarrollo son la descomposición multipolar de un potencial y el método de las integrales de Talmi junto con la transformación de Moshinsky.

Una vez obtenidos los elementos, se aplican en el estudio de diferentes núcleos de ejemplos. Hay dos maneras habituales de solucionar el Hamiltoniano sobre un determinado sistema, y es por medio de la diagonalización directa junto con la mezcla de configuraciones o bien empleando un método variacional de campo medio.

Son planteamientos diferentes, el primer caso obtiene la solución exacta de un conjunto de nucleones en un espacio de valencia ¹ diagonalizando el hamiltoniano, de la mezcla de configuraciones resultante se obtiene el espectro del núcleo [25] [31] .

Por otra parte, una forma general de resolver el problema nuclear es con métodos aproximados, como por ejemplo, el campo medio autoconsistente[15] [18]. Están basados en el teorema de Ritz, buscan en un espacio variacional la solución que minimiza la energía. En este caso, el problema del sistema de A nucleones interactuantes se reduce a la suma de la interacción del campo promedio, generado por $A - 1$ partículas, con el nucleón restante. Las ecuaciones del campo medio generado depende de las propias soluciones, con lo que se aborda un problema no lineal. El procedimiento variacional que empleo en las comprobaciones es el de Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB) [15] con proyección al número de partículas como método más allá del campo medio, técnica que aproxima más nuestra solución a la exacta.

2.1. Naturaleza de la fuerza nuclear y tipos de interacciones nucleares.

Para resolver el problema nuclear de muchos cuerpos solo tenemos en cuenta interacciones efectivas a dos cuerpos. La fuerza nuclear es un fenómeno emergente de la interacción fuerte, pero difícilmente se puede estudiar un núcleo abordándolo desde la cromodinámica cuántica.

Históricamente está descrita como una fuerza de corto alcance pero de una magnitud altamente atractiva (y repulsiva a muy cortas distancias), mucho más intensa que la interacción de Coulomb. Además, la interacción nuclear respeta con un grado grande de precisión la simetría de carga (que la interacción protón-protón sea igual a la del neutrón-neutrón) y la independencia de la carga (los protones también interactúan igual con los neutrones); De esta manera, si los nucleones se encuentran en los mismos estados espaciales y de espín, las fuerzas que actúan entre dos protones, dos neutrones y un protón con un neutrón son prácticamente iguales.

La interacción nuclear debe tener en consideración el efecto que el estado de los nucleones tiene con respecto a su intercambio, produciendo una ganancia o pérdida energética. El principio de exclusión de Pauli junto con el efecto del intercambio explica la saturación observada en la materia nuclear.

Además, la interacción nuclear no se limita solo a la interacción de dos cuerpos, no obstante aquí se presenta únicamente este caso, cuya contribución es la más importante. En el caso de interacción a dos cuerpos, tenemos dos posibilidades dependientes de las coordenadas espaciales: las interacciones locales $V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$, que dependen de las posiciones de las partículas (ejemplos de estos son las fuerzas centrales (Sección 3) y el potencial tensor (Sección 4.2)); y los potenciales no locales $V(\vec{r}_1, \vec{p}_1, \vec{r}_2, \vec{p}_2)$ que poseen una dependencia adicional del momento [6] [14] [27] . Los potenciales no locales son también conocidos como potenciales dependientes de la velocidad y destaca

¹La resolución de un problema de muchos cuerpos puede no ser abordable si el número de partículas empleado dispara la dimensión de la base de trabajo, especialmente en la resolución por diagonalización directa. No obstante, si no nos interesan transiciones de muy alta energía, las partículas que completan números mágicos no pueden ser promovidos debido a la energía necesaria, constituyendo un núcleo (o core) inerte, las partículas restantes interactúan en una parte de la base de estados en un rango de energía más razonable, este espacio restringido se denomina espacio de valencia.

entre ellos la interacción de espín-órbita, que se detallará en la Sección 4.1.

Por último, un potencial de interacción a dos cuerpos debe respetar una serie de relaciones de simetría [14] y debe ser invariante respecto a: la traslación, al intercambio de coordenadas, al reverso temporal, reflexiones espaciales, rotaciones tanto en el espacio de coordenadas como en el de isospín e invariante Galileano ².

En el planteamiento habitual de un problema de muchos cuerpos emplea el formalismo de la **segunda cuantización**, en la cual el Hamiltoniano es descrito por:

$$\hat{H} = \sum_{ab} t_{ab} c_a^\dagger c_b + \frac{1}{4} \sum_{abcd} \bar{v}_{abcd} c_a^\dagger c_b^\dagger c_c c_d \quad (1)$$

donde la interacción, representada por los **elementos de matriz antisimetrizados a dos cuerpos** viene definida por

$$\bar{v}_{abcd} = v_{abcd} - v_{abdc} \quad v_{abcd} = \langle ab | \hat{V} | cd \rangle \quad t_{ab} = \langle a | \hat{T} | b \rangle \quad (2)$$

y los operadores c^\dagger/c denotan la creación y aniquilación de una partícula en un determinado estado sobre el vacío de partículas $|-\rangle$, satisfacen el principio de antisimetrización de los fermiones.

$$\begin{aligned} c_a^\dagger |-\rangle &= |\phi_a\rangle & c_a |-\rangle &= 0 \\ \{c_a^\dagger, c_b^\dagger\} &= \{c_a, c_b\} = 0 & \{c_a^\dagger, c_b\} &= \delta_{a,b} \end{aligned} \quad (3)$$

Las etiquetas hacen referencia a una base estados, normalmente a los números cuánticos de un oscilador en diferentes versiones y los valores que denotan el estado de espín e isospín de la función de onda a un cuerpo.

Podemos clasificar las interacciones nucleares en dos grupos:

1. **Elementos de matriz *ab-initio* o de interacciones realistas**, las cuales se calculan a partir de la interacción nucleón-nucleón libre, comenzando por el ajuste de, entre otros datos, los desplazamientos de fase del scattering de partículas así como de ciertas propiedades del deuterón, del tritón y del ³He. Procesos hasta un máximo en energía de los protones de 350 MeV (sistema laboratorio), teniendo en cuenta solo los canales de onda-S,P y D.

Además, deben introducirse interacciones a tres cuerpos para poder reproducir núcleos muy ligeros (alrededor de $A=12$) y para núcleos más grandes se tiene que recurrir a técnicas de renormalización de esas interacciones como el *similarity renormalization group* (SRG) [7] [8], aunque su rango de aplicabilidad está todavía limitado.

Entre las interacciones *ab-initio* más conocidas se encuentra por ejemplo el potencial Hamada-Johnston. Actualmente los potenciales más usados son los que provienen de la teoría de campos efectiva quiral (*chiral effective field theory*, *XEFT*) [7].

Hay ciertos inconvenientes con estas interacciones, comenzando por que el comportamiento de los nucleones en el núcleo es diferente del caso libre, entre otros motivos por el efecto que el núcleo inerte tiene en las partículas de las órbitas externas. Además estos potenciales presenta un infinito debido al core repulsivo, con el cual no se puede aplicar los métodos de campo medio ³.

2. Las **interacciones efectivas en el medio nuclear**. En ellas se tiene en cuenta que la interacción nuclear está renormalizada por la presencia de otros nucleones dentro del núcleo. Estas interacciones, que normalmente son a dos cuerpos, son las que se usan en general para describir propiedades en toda la tabla de núcleos.

Además, los elementos de matriz a dos cuerpos de la interacción nuclear se pueden hallar asumiendo una forma del potencial con mayor o menor grado de complicación cuyos parámetros de interacción se ajustan para reproducir algunos observables experimentales como las masas, radios y/o los espectros de excitación; a estas interacciones se las denominan como **fenomenológicas**. Cuando la forma funcional de de estas interacciones se simplifica mucho, pasan a clasificarse como esquemáticas.

Aquí se presentan dos interacciones de este tipo: la interacción de Brink-Boeker y las interacciones de rango cero SDI y MSDI.

²Que no cambia si se le transforma a un sistema de referencia que se mueve a velocidad constante, por lo que depende del momento relativo de las partículas $\vec{p} = \frac{1}{2}(\vec{p}_1 - \vec{p}_2)$

³El método de Brueckner permite renormalizar estos infinitos, el cual reemplaza el potencial por el calculo de la matriz G. Núcleos de pocas partículas o con doble cierre de capas pueden abordarse de esta forma al utilizarlo en conjunto con métodos de Hartree-Fock.

2.2. Funciones de onda monoparticulares.

Antes de comenzar, es conveniente que defina las las funciones de onda y la notación que se empleará en las siguientes secciones. La base que se usará en los cálculos es la de una partícula en un potencial **de oscilador armónico isótropo**, descrita **en coordenadas esféricas**.

$$V(\vec{r}) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad (4)$$

La función consiste entonces en una parte radial $\mathcal{R}_{n,l}(r)$ y en un armónico esférico $Y_{lm}(\theta, \phi)$:

$$\psi(\vec{r}) = \mathcal{R}_{n,l}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (5)$$

Donde n es el número cuántico radial ($n \geq 0$), l el número cuántico orbital ($l = 0(s), 1(p), 2(d) \dots$) y m_l su tercera componente ($m = -l, \dots, l$). También es importante definir el **número cuántico principal** $N = 2n + l$, del que depende la energía de los estados del oscilador armónico:

$$E_{n,l} = \hbar \omega \left(N + \frac{3}{2} \right) \quad (6)$$

El potencial tiene asociada una **energía de oscilador** $\hbar \omega$ y una **longitud de oscilador** característica asociada a la magnitud del potencial $b = \sqrt{\frac{\hbar}{m \omega}}$. Estas se deben precisar para realizar las simulaciones. Existe una fórmula aproximada para obtener los parámetros, deducida del radio cuadrático medio experimental del núcleo:

$$\begin{aligned} \hbar \omega &= 41 A^{-1/3} \text{ [MeV]} \\ b &= 1.010 A^{-1/6} \text{ [fm]} \end{aligned} \quad (7)$$

Las funciones radiales $\mathcal{R}_{n,l}$ son dependientes de los polinomios asociados de Laguerre $L_n^k(r)$, no obstante, las funciones de Laguerre pueden expresarse como una serie finita en potencias de r :

$$\mathcal{R}_{n,l}(r) = \left(\frac{r}{b} \right)^l \exp \left(-\frac{r^2}{2b^2} \right) \sum_{k=0}^n \alpha_{nlk} \left(\frac{r}{b} \right)^{2k} \quad (8)$$

donde los coeficientes de normalización α_{nlk} son:

$$\alpha_{nlk} = \sqrt{\frac{2(n!)}{b^3 \Gamma(n+l+3/2)}} \binom{n+l+1/2}{n-k} \frac{(-1)^k}{k!} \quad (9)$$

donde $\Gamma(x)$ es la función gamma.

Por otra parte, debemos considerar la presencia del espín, por lo que la parte angular de las funciones de onda debe tener en cuenta el espín intrínseco. En general, todos los estados cuánticos que aparecen en este trabajo se describen en acoplo jj , es decir, con las funciones de onda de una partícula de espín $s = 1/2$ y de momento orbital l acopladas a un **momento angular total** j y su tercera componente m .

Además, en este trabajo se emplea el formalismo del isospín, en el cual se describen al protón y al neutrón como los estados de una misma partícula (nucleón), la cual tiene asociado un momento angular especial denominado **isospín** ($t=1/2$). La distinción entre el estado protón y el estado neutrón viene dado por su tercera componente m_t . Esta cantidad sigue las mismas reglas de acoplo que el momento angular.

En el trabajo, las funciones de onda a dos cuerpos que empleo son estados jj acoplados a un momento angular total J e isospín total T .

$$\begin{aligned} |ab(JM; TM_T)\rangle &\equiv |n_a l_a s_a j_a t_a, n_b l_b s_b j_b t_b(JM; TM_T)\rangle = \\ &= N_{ab}(JT) \sum_{m_a m_b, m_a^T m_b^T} \begin{bmatrix} j_a & j_b & J \\ m_a & m_b & M \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1/2 & 1/2 & T \\ m_a^T & m_b^T & M_T \end{bmatrix} |n_a l_a s_a j_a m_a, n_b l_b s_b j_b m_b\rangle |t_a m_a^T, t_b m_b^T\rangle \end{aligned} \quad (10)$$

donde los símbolos entre corchetes son coeficientes de Clebsch-Gordan (notación que usaré en todo el trabajo). La normalización viene dada por

$$N_{ab}(JT) = \frac{\sqrt{1 - \delta_{ab}(-1)^{J+T}}}{1 + \delta_{ab}} \quad (11)$$

3. Fuerzas centrales e intercambio de espín e isospín

Si asumimos que la fuerza nuclear deriva de un potencial y que es independiente de la velocidad, el potencial nucleón-nucleón dependerá de las coordenadas de posición relativa, así como de las variables de espín σ e isospín τ de cada nucleón. Esta función debe ser un escalar en el espacio de configuración (espín-coordenadas) e invariante bajo rotaciones y reflexiones espaciales.

Esta función se puede obtener como una combinación lineal de los operadores $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)$, $(\tau_1 \cdot \tau_2)$ y $(\sigma_1 \cdot \vec{r})(\sigma_2 \cdot \vec{r})$, donde $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ y $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ multiplicandos por su correspondiente parte radial $V(r)$, cuya forma puede ser de tipo Yukawa, Gaussiana, ... y depende de constantes que deberemos extraer de resultados experimentales [6] [14] [27].

$$V(\vec{r}_1 \vec{r}_2; \sigma_1 \sigma_2, \tau_1 \tau_2) = V_0(r) + V_\sigma(r) \sigma_1 \cdot \sigma_2 + V_\tau(r) \tau_1 \cdot \tau_2 + V_{\sigma\tau}(r) (\sigma_1 \cdot \sigma_2) (\tau_1 \cdot \tau_2) + V_T(r) S_{12} + V_{T-\tau}(r) S_{12}(\tau_1 \cdot \tau_2) \quad (12)$$

Donde el operador tensor S_{12} corresponde a la parte no central de la interacción, detallada en la sección 4.2 y que se descarta aquí.

Reducimos los potenciales a una misma función escalada una determinada magnitud correspondiente a su contribución, es decir:

$$V(r) = \frac{V_0(r)}{A_0} = \frac{V_\sigma(r)}{A_\sigma} = \frac{V_\tau(r)}{A_\tau} = \frac{V_{\sigma\tau}(r)}{A_{\sigma\tau}}$$

El potencial central simplificado resulta en la expresión siguiente.

$$V(\vec{r}_1 \vec{r}_2; \sigma_1 \sigma_2, \tau_1 \tau_2) = V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|) \{A_0 + A_\sigma \sigma_1 \cdot \sigma_2 + A_\tau \tau_1 \cdot \tau_2 + A_{\sigma\tau} (\sigma_1 \cdot \sigma_2) (\tau_1 \cdot \tau_2)\} \quad (13)$$

La elección de esta forma de potencial tiene su origen en el concepto de las fuerzas de intercambio. En este caso, el efecto del espín e isospín se expresa con los **operadores de intercambio**:

$$P^\sigma = \frac{1 + \sigma_1 \cdot \sigma_2}{2} \quad P^\tau = \frac{1 + \tau_1 \cdot \tau_2}{2} \quad P^\sigma P^\tau P^\sigma = -1 \quad (14)$$

La ecuación general de las fuerzas de intercambio es similar a (12), se expresa como [14] :

$$V(r; \sigma_1 \sigma_2, \tau_1 \tau_2) = V_W(r) + V_M(r) P^\tau + V_B(r) P^\sigma - V_H(r) P^\sigma P^\tau \quad (15)$$

Por motivos históricos, las diferentes componentes se nombran en honor a los físicos: Wigner, Majorana, Barlett y Heisenberg. Considerando que los diferentes potenciales de (14) son todos de la forma $V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ escalados un determinado factor A , el paso de la ecuación (13) a (14) se obtiene despejando las constantes directamente.

$$\begin{pmatrix} V_W \\ V_M \\ V_B \\ V_H \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -4 \\ 0 & 2 & 0 & -2 \\ 0 & 0 & 2 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_0 \\ A_\sigma \\ A_\tau \\ A_{\sigma\tau} \end{pmatrix} \quad (16)$$

Veamos como se aplican estos potenciales de **interacción a dos cuerpos** en el modelo de capas. De acuerdo con el modelo de capas extremo, los nucleones que se encuentran en el espacio de valencia se mueven independientemente interactuando con un potencial promedio generado por todo el núcleo. No obstante, para ir más allá de esta aproximación debemos plantear las interacciones relativas a dos cuerpos.

La interacción residual a dos cuerpos depende de la distancia distancia entre los nucleones, así como de los estados de espín e isospín. La forma general del elemento de matriz de tipo central [27] es entonces :

$$v_{abcd} = \langle \psi_a(\vec{r}_1) \psi_b(\vec{r}_2) | V(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|; \sigma_1 \sigma_2, \tau_1 \tau_2) | \psi_c(\vec{r}_1) \psi_d(\vec{r}_2) \rangle \quad (17)$$

Hay dos formas diferentes de obtener estos elementos y que desarrollaremos en esta sección, pueden ser :

- Evaluando el potencial en términos de las coordenadas \vec{r}_1 y \vec{r}_2 ; y desarrollando este en serie de armónicos esféricos (sección 3.1). Este método, a veces denominado de las *integrales de Slater*, es común en física atómica pero no especialmente en física nuclear, por razones que veremos.
- Transformando las funciones de onda del sistema $\vec{r}_1 \vec{r}_2$ al sistema de referencia de coordenada relativa y de centro de masas \vec{r} y \vec{R} por medio de la transformación de Moshinsky. En dicho sistema, se puede evaluar de forma sencilla una gran cantidad de potenciales $V(r)$ por medio de las integrales de Talmi (ver sección 3.2).

3.1. Descomposición multipolar de una interacción central general.

Como se puede encontrar en la referencia [6], una perspectiva general para poder resolver elementos de matriz de tipo central es desarrollar el potencial de interacción a dos cuerpos en una serie multipolar.

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \sum_k v_k(r_1, r_2) \sum_{\mu} Y_{k\mu}^*(\hat{\Omega}_1) Y_{k\mu}(\hat{\Omega}_2) = \sum_k v_k(r_1, r_2) \mathbf{Y}_k(\hat{\Omega}_1) \cdot \mathbf{Y}_k(\hat{\Omega}_2) \quad (18)$$

donde \vec{r}_i denotan vectores en coordenadas esféricas, siendo r_i la distancia hasta el origen y $\hat{\Omega}_i$ la dirección angular (θ, ϕ) . Cada elemento de dependencia radial se evalúa integrando los polinomios de Legendre y la expresión del potencial sobre el ángulo θ_{12} (que es el ángulo entre los vectores \vec{r}_1 y \vec{r}_2):

$$v_k(r_1, r_2) = 2\pi \int_{-1}^1 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) P_k(\cos(\theta_{12})) d\cos(\theta_{12}) \quad (19)$$

Esta expresión puede complicarse considerablemente dependiendo del potencial. Hay interacciones en las que puede dar una solución analítica simple; en general (si es que las integrales se pueden resolver), conllevará una serie infinita.

Volviendo a (13), para evaluar los elementos de matriz a dos cuerpos con las funciones de onda acopladas en espín e isospín, vamos a hacer el desarrollo multipolar. En primer lugar, partimos de funciones de onda a dos cuerpos normalizadas, después, para que el elemento de matriz $\langle ab(JT)|V|cd(JT) \rangle$ este antisimetrizado intercambiamos los estados del ket $|cd(JT) \rangle$ tanto en espín como en isospín, lo cual añade una fase procedente del intercambio de los coeficientes Clebsh-Gordan de (10). Los elementos antisimetrizados son:

$$\langle ab(JT)|V|cd(JT) \rangle_{as} = \langle ab(JT)|V|cd(JT) \rangle - (-)^{j_c+j_d-J+1-T} \langle ab(JT)|V|dc(JT) \rangle \quad (20)$$

Al evaluar las funciones de onda sobre un potencial de la forma (18) tenemos una serie infinita con un término radial y otro angular:

$$\langle ab(JT)|V|cd(JT) \rangle = \sum_k R_{abcd}^{(k)} \Phi_{abcd}^{(k)}(JT) \quad (21)$$

$$R_{abcd}^{(k)} = N_{ab}(JT) N_{cd}(JT) \int_0^\infty r_1^2 dr_1 \int_0^\infty r_2^2 dr_2 \mathcal{R}_{n_a l_a}(r_1) \mathcal{R}_{n_c l_c}(r_1) v_k(r_1, r_2) \mathcal{R}_{n_b l_b}(r_2) \mathcal{R}_{n_d l_d}(r_2) \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \Phi_{abcd}^{(k)}(JT) = & \langle ab(JT) | [A_0 + A_\tau (\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)] (\mathbf{Y}(1) \cdot \mathbf{Y}(2)) + \\ & + [A_\sigma + A_{\sigma\tau} (\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2)] (\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) (\mathbf{Y}(1) \cdot \mathbf{Y}(2)) | cd(JT) \rangle \end{aligned} \quad (23)$$

En esta última ecuación se desarrollan tres productos escalares : la parte angular $\mathbf{Y}(1) \cdot \mathbf{Y}(2)$, la parte angular junto con el espín $(\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2) (\mathbf{Y}(1) \cdot \mathbf{Y}(2))$ y el término $\boldsymbol{\tau}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_2$. Muchas de las identidades del álgebra del momento angular están extraídas de los manuales [4] y [28].

En primer lugar, el término $\mathbf{Y}(1) \cdot \mathbf{Y}(2)$ se evalúa por medio de una identidad derivada del teorema de Wiener-Eckhart para el producto escalar:

$$\begin{aligned} \langle ab(JT) | \mathbf{Y}^{(k)}(1) \cdot \mathbf{Y}^{(k)}(2) | cd(JT) \rangle = \\ (-)^k (2k+1) \sqrt{2J+1} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & J \\ j_c & j_d & J \\ k & k & 0 \end{Bmatrix} (a || \mathbf{Y}^{(k)}(1) || c) (b || \mathbf{Y}^{(k)}(2) || d) = \\ (-)^{j_b+J+j_c} \sqrt{2k+1} \begin{Bmatrix} j_a & j_b & J \\ j_d & j_c & k \end{Bmatrix} (a || \mathbf{Y}^{(k)}(1) || c) (b || \mathbf{Y}^{(k)}(2) || d) \end{aligned} \quad (24)$$

Donde el último paso es una propiedad de los símbolos 9j. Todos los elementos denotados en la forma $(\alpha || X || \beta)$

son elementos de matriz reducidos, los dos últimos pueden evaluarse analíticamente ⁴

$$\begin{aligned}
(a||\mathbf{Y}^{(k)}(1)||c) &\equiv (l_a, \frac{1}{2}, j_a || \mathbf{Y}^{(k)}(1) || l_c, \frac{1}{2}, j_c) = \\
&= (-)^{l_a - \frac{1}{2} + j_c + k} \sqrt{(2j_a + 1)(2j_c + 1)} \left\{ \begin{matrix} l_a & l_c & k \\ j_c & j_a & 1/2 \end{matrix} \right\} (l_a || \mathbf{Y}^{(k)} || l_c) = \\
&= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-)^{j_c - \frac{1}{2} + k} \frac{1 + (-1)^{l_a + l_c + k}}{2} \sqrt{(2j_a + 1)(2j_c + 1)(2k + 1)} \begin{pmatrix} j_a & j_c & k \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{26}$$

Después, para los estados a dos cuerpos, la parte dependiente del isospín no depende de las demás variables, por lo que se evalúa por separado en función del estado de isospín total.

$$\begin{aligned}
\langle T^2 \rangle_T &= T(T + 1) = \frac{1}{4} \langle \tau_1^2 + \tau_2^2 + 2\tau_1 \cdot \tau_2 \rangle_T \\
\langle \tau_{1,2}^2 \rangle_T &= \langle \tau_{1,2}^2 (x) \rangle_T + \langle \tau_{1,2}^2 (y) \rangle_T + \langle \tau_{1,2}^2 (z) \rangle_T = 3 \\
\langle \tau_1 \cdot \tau_2 \rangle_T &= \frac{1}{2} (4T(T + 1) - 6) = \begin{cases} +1 & T = 1 \quad (Triplete) \\ -3 & T = 0 \quad (Singlete) \end{cases}
\end{aligned}$$

Esto no puede realizarse para el caso que depende del espín, ya que estos operadores se acoplan con los armónicos esféricos. El resultado no obstante se evalúa de forma muy similar al primer caso (24) (26). Primero debemos expresar $(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\mathbf{Y}^{(k)}(1) \cdot \mathbf{Y}^{(k)}(2))$ de forma que podamos aplicar (24), para ello acoplamos σ_1 con $\mathbf{Y}^{(k)}(1)$ (igual con los elementos del segundo cuerpo) para que resulte en un tensor irreducible de rango r con respecto a j_1

$$(\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\mathbf{Y}^{(k)}(1) \cdot \mathbf{Y}^{(k)}(2)) = \sum_{r=|k-1|}^{k+1} (-)^{k+r+1} \left([\sigma_1 \times \mathbf{Y}^{(k)}(1)]^{(r)} \cdot [\sigma_2 \times \mathbf{Y}^{(k)}(2)]^{(r)} \right) \tag{27}$$

Evaluamos de nuevo la expresión (24) con los nuevos tensores, para luego aplicar la forma general de los elementos de matriz reducidos del tensor resultante del producto tensorial de otros dos tensores.

$$\begin{aligned}
\langle ab (JT) | (\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\mathbf{Y}^{(k)}(1) \cdot \mathbf{Y}^{(k)}(2)) | cd (JT) \rangle &= \\
&= (-)^{j_b + J + j_c + k + 1} \sum_{r=|k-1|}^{k+1} (-)^r \sqrt{2r + 1} \left\{ \begin{matrix} j_a & j_b & J \\ j_d & j_c & k \end{matrix} \right\} \\
&\quad (a || [\sigma_1 \times \mathbf{Y}^{(k)}(1)]^{(r)} || c) (b || [\sigma_2 \times \mathbf{Y}^{(k)}(2)]^{(r)} || d)
\end{aligned} \tag{28}$$

Donde los dos elementos reducidos son

$$\begin{aligned}
(a || [\sigma_1 \times \mathbf{Y}^{(k)}(1)]^{(r)} || c) &\equiv (l_a, \frac{1}{2}, j_a || [\sigma_1 \times \mathbf{Y}^{(k)}(1)]^{(r)} || l_c, \frac{1}{2}, j_c) = \\
&= \sqrt{(2j_a + 1)(2j_c + 1)(2r + 1)} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & l_a & j_a \\ \frac{1}{2} & l_c & j_c \\ 1 & k & r \end{matrix} \right\} (l_a || \mathbf{Y}^{(k)}(1) || l_c) (\frac{1}{2} || \sigma_1 || \frac{1}{2})
\end{aligned} \tag{29}$$

Finalmente, las expresiones analíticas para las dos últimas funciones son

$$(l_a || \mathbf{Y}^{(k)} || l_c) = (-)^{l_a} \frac{\sqrt{(2l_a + 1)(2k + 1)(2l_c + 1)}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} j_a & k & j_c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{30}$$

$$(\frac{1}{2} || \sigma || \frac{1}{2}) = \sqrt{6} \tag{31}$$

En resumen, la parte angular está desarrollada y determinada. Solo queda sustituir el resultado (26) en (24) y los elementos (31) y (30) en (29) y este en (28)

$$\begin{aligned}
\Phi_{abcd}^{(k)}(JT) &= \langle ab (JT) | \mathbf{Y}^{(k)}(1) \cdot \mathbf{Y}^{(k)}(2) | cd (JT) \rangle [A_0 + A_\tau (\delta_{T1} - 3\delta_{T0})] + \\
&\quad + \langle ab (JT) | (\sigma_1 \cdot \sigma_2)(\mathbf{Y}^{(k)}(1) \cdot \mathbf{Y}^{(k)}(2)) | cd (JT) \rangle [A_\sigma + A_{\sigma\tau} (\delta_{T1} - 3\delta_{T0})]
\end{aligned} \tag{32}$$

Pero todavía no hemos concluido, ya que dependemos del tipo de potencial para poder obtener la integral radial. La surface delta interaction (SDI) tiene solución analítica para este método, en general no es así, y hay que emplear métodos más avanzados que la aproximación por integración directa.

⁴Para evaluar este elemento se emplea el elemento $(l || \mathbf{Y}^{(k)} || l')$ definido en (30) más adelante. Hay que utilizar además una identidad de los símbolos 3j y 6j:

$$\sqrt{(2l_a + 1)(2l_c + 1)} \begin{pmatrix} l_a & k & l_c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} l_a & l_c & k \\ j_a & j_c & 0 \end{matrix} \right\} = - \begin{pmatrix} j_a & k & j_c \\ -1/2 & 0 & 1/2 \end{pmatrix} \frac{1 + (-1)^{l_a + k + l_c}}{2} \tag{25}$$

3.2. El método de las integrales de Talmi y la transformación de Brody-Moshinsky

La función de onda a dos cuerpos (5), expresada en el sistema \vec{r}_1 y \vec{r}_2 , puede escribirse en términos del sistema de referencia relativo $\vec{r} = (r, \hat{\omega})$ y del centro de masas $\vec{R} = (R, \hat{\Omega})$ [1] :

$$\vec{r} = \frac{\vec{r}_1 - \vec{r}_2}{\sqrt{2}} \quad \vec{R} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{\sqrt{2}} \quad (33)$$

Esta forma de definir las coordenadas relativos \vec{r} y las del centro de masa \vec{R} hacen que las funciones de oscilador armónico tengan la misma forma en los dos sistemas de referencia [3]. Denotamos los números cuánticos del sistema relativo por n y l y los del centro de masas por N y L . Las funciones de onda de los dos sistemas de referencia, acopladas a un momento angular orbital total λ , están dadas por:

$$\begin{aligned} |n_1, l_1, n_2, l_2; \lambda, \mu\rangle &= \sum_{m_1, m_2} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & \lambda \\ m_1 & m_2 & \mu \end{bmatrix} \mathcal{R}_{n_1 l_1}(r_1) Y_{l_1 m_1}(\hat{\Omega}_1) \mathcal{R}_{n_2 l_2}(r_2) Y_{l_2 m_2}(\hat{\Omega}_2) \\ |n, l, N, L; \lambda, \mu\rangle &= \sum_{m, M} \begin{bmatrix} l & L & \lambda \\ m & M & \mu \end{bmatrix} \mathcal{R}_{nl}(r) Y_{lm}(\hat{\omega}) \mathcal{R}_{NL}(R) Y_{LM}(\hat{\Omega}) \end{aligned} \quad (34)$$

El cambio de base requiere evaluar los brackets de transformación de Moshinsky $\langle nl, NL; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle$:

$$|n_1, l_1, n_2, l_2; \lambda, \mu\rangle = \sum_{nl, NL} \langle nl, NL; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle |n, l, N, L; \lambda, \mu\rangle \quad (35)$$

Ambos kets corresponden a la misma energía (6), los estados en ambos sistemas tienen que tener un número principal de oscilador equivalente ($N = 2n + l$), y seguir la regla de **conservación de la energía**:

$$2n + l + 2N + L = 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 \quad (36)$$

Regla que además asegura la **conservación de la paridad** entre sistemas:

$$(-)^{l+L} = (-)^{l_1+l_2} \quad (37)$$

Los autoestados a dos cuerpos en ambos sistemas componen una base ortonormal, de dicha propiedad se deduce que los brackets de transformación obedecen también la regla de ortonormalidad:

$$\begin{aligned} \sum_{n_1 l_1 n_2 l_2} \langle nl, NL; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle \langle n' l', N' L'; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle &= \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{NN'} \delta_{LL'} \\ \sum_{nl, NL} \langle n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda | nl, NL; \lambda \rangle \langle n' l', N' L'; \lambda | nl, NL; \lambda \rangle &= \delta_{n_1 n'_1} \delta_{l_1 l'_1} \delta_{n_2 n'_2} \delta_{l_2 l'_2} \end{aligned} \quad (38)$$

Y cumplen una serie de relaciones de simetría entre ellos, las cuales pueden ser de utilidad en la tabulación numérica de los mismos o en su comprobación.

$$\begin{aligned} \langle nl, NL; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle &= (-)^{L-\lambda} \langle nl, NL; \lambda | n_2 l_2, n_1 l_1; \lambda \rangle \\ &= (-)^{l_1-\lambda} \langle NL, nl; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle \\ &= (-)^{l_1+\lambda} \langle NL, nl; \lambda | n_2 l_2, n_1 l_1; \lambda \rangle \\ &= (-)^{l_2+L} \langle n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda | nl, NL; \lambda \rangle \end{aligned} \quad (39)$$

La manera en la que se obtienen estos brackets de transformación es a partir de un bracket inicial $n_1 = n_2 = 0$, el elemento $\langle nl, NL; \lambda | 0 l_1, 0 l_2; \lambda \rangle$ puede evaluarse analíticamente para todo conjunto nl, NL (teniendo en cuenta además que $|L - l| \leq \lambda \leq L + l$). El resto de brackets $n_1, n_2 \neq 0$ se obtienen con relaciones de recurrencia desde los primeros.

3.2.1. Relaciones de recurrencia

Como hemos dicho, los brackets de Brody-Moshinsky no tienen una expresión general pero sí están relacionados entre ellos. El bracket $\langle nl, NL; \lambda | (n_1 + 1) l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle$ puede describirse como la combinación de los paréntesis $\langle nl, NL; \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2; \lambda \rangle$ de un orden menor y el elemento de matriz dependiente de $-r_1^2$.

$$\begin{aligned} \langle nl, NL, \lambda | (n_1 + 1) l_1, (n_2) l_2, \lambda \rangle &= \frac{1}{\sqrt{(n_1 + 1)(n_1 + l_1 + 3/2)}} \times \\ &\sum_{n' l' N' L'} \langle nl, NL, \lambda | -r_1^2 | n' l', N' L', \lambda \rangle \langle n' l', N' L', \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \rangle \end{aligned} \quad (40)$$

Iterando varias veces alcanzamos el caso $n_1 = n_2 = 0$. El elemento $\langle nl, NL, \lambda | 0l_1, 0l_2, \lambda \rangle$ puede evaluarse analíticamente [1].

La obtención de estas reglas, de los elementos de matriz de $-r_1^2$ y del elemento $\langle nl, NL, \lambda | 0l_1, 0l_2, \lambda \rangle$ se encuentran adjuntadas en el Apéndice A.

3.2.2. Elementos de matriz para una fuerza central.

En una interacción central, determinada por un potencial $V(r)$, depende solo de la distancia inter-nucleónica ⁵, se puede aplicar directamente la transformación de Moshinsky:

$$\langle n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \mu | V(r) | n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \lambda' \mu' \rangle = \sum_{\substack{n l N L \\ n' l' N' L'}} \langle n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda | n l, N L, \lambda \rangle \langle n'_1 l'_1, n'_2 l'_2, \lambda' | n' l', N' L', \lambda' \rangle \langle n l || V(r) || n' l' \rangle \delta_{\lambda \lambda'} \delta_{\mu \mu'} \delta_{N N'} \delta_{L L'} \delta_{l l'} \quad (41)$$

Donde el número n' es $n' = (n'_1 + n'_2) - (n_1 + n_2) + \frac{1}{2}(l'_1 + l'_2 - l_1 - l_2) + n$, restringido energéticamente por (36). Veamos como se obtiene el elemento de matriz reducido.

3.2.3. Las Integrales de Talmi

Con los brackets de transformación dados en (35) pueden ser evaluados los elementos de matriz de una interacción de tipo central, Espín-Órbita y Tensorial [1]. Los elementos de matriz se pueden expresar a su vez en términos de los **elementos de matriz reducidos** $\langle n l || V(r) || n' l' \rangle$.

I. Talmi demostró [3] que una integral radial $\langle n l || V(r) || n' l' \rangle$ puede expresarse como una suma ponderada de integrales radiales, las cuales se conocen como **integrales de Talmi** I_p y se escogen como base.

$$\langle n l || V(r) || n' l' \rangle = \int_0^\infty r^2 dr \mathcal{R}_{nl}(r) V(r) \mathcal{R}_{n'l'}(r) = \sum_p B(nl, n' l', p) I_p \quad (42)$$

Donde p es un entero que va desde $\frac{1}{2}(l + l')$ hasta $\frac{1}{2}(l + l') + n + n'$. Las integrales están definidas como

$$I_p = \frac{2}{\Gamma(p + 3/2)} \int_0^\infty \left(\frac{r}{b}\right)^{2p} \exp\left(-\frac{r^2}{b^2}\right) V(r) r^2 dr \quad (43)$$

La evaluación de las integrales de Talmi depende del potencial de interacción $V(r)$ escogido. En este trabajo solo empleo el potencial Gaussiano $V(r) = \exp(-r^2/\mu^2)$, para el cual la integral vale

$$I_p = \frac{b^3}{(1 + (b/\mu)^2)^{p+3/2}} \quad (44)$$

donde μ tiene unidades de longitud.

Los índices $B(nl, n' l', p)$ así como la deducción de la descomposición no es necesaria aquí, pero puede encontrarse en el Apéndice B

La sencillez de estas expresiones y del método de transformación en general contrasta con la perspectiva de la descomposición multipolar antes mencionada. El denominado *método de Slater* para la evaluación de elementos de matriz concluye con desarrollos en serie infinitos (aunque limitados por las reglas de adición del momento angular) para la expresión (21), en la cual, las integrales (19) y (22) tienen un valor menos práctico en física nuclear ⁶.

3.3. Interacción de Brink-Boeker

Esta interacción efectiva, trata de simular la parte de largo alcance en fuerza nuclear. Para ello, se emplea la suma de dos funciones gaussianas con un intercambio de espín-isospín (como el que introduce en (15)).

$$V^{BB}(r) = \sum_{i=1,2} e^{-r^2/\mu_i^2} \left(V_W^{(i)} + V_M^{(i)} P^r + V_B^{(i)} P^\sigma - V_H^{(i)} P^r P^\sigma \right) \quad (45)$$

⁵los números cuánticos de los momentos angulares no pueden cambiar.

⁶ Este no es el caso de la interacción de Coulomb, ya que $1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ acepta una descomposición en polinomios de Legendre. Es por esta ventaja que el método de las integrales de Slater se pueda aprovecha en el campo de la espectroscopía atómica. En la física atómica, las funciones radiales pueden no estar bien definidas, por lo que las integrales radiales v_k se tratan como parámetros (parámetros de Slater), los cuales se extraen de la espectroscopía; en el caso nuclear, la cantidad limitada de los espectros disponibles tampoco permite la evaluación de estos coeficientes.

El cual requiere el ajuste de diez parámetros. En el artículo original [5] solo aparecen los términos de Wigner y Majorana ($V_B^{(i)} = V_H^{(i)} = 0$). Dado que se fijan además los valores $\mu_1 = \frac{1}{2}\mu_2$ fijos en un cierto rango ($0.8 \leq \mu_1 \leq 1.4$), se necesitan ajustar solamente cuatro cantidades.

El planteamiento, con los parámetros ajustados, consiste en un potencial repulsivo para los estados impares respecto al intercambio espacial de las partículas y atractivo en un cierto intervalo para los estados de paridad par (Ver Figura 1).

Los elementos de matriz de Brink-Boeker están planteados para obtener la energía de ligadura de ciertos núcleos ligeros [5], dichos cálculos no consideran un *core* y las energías de partícula independiente son las debidas al potencial de oscilador armónico esférico (6).

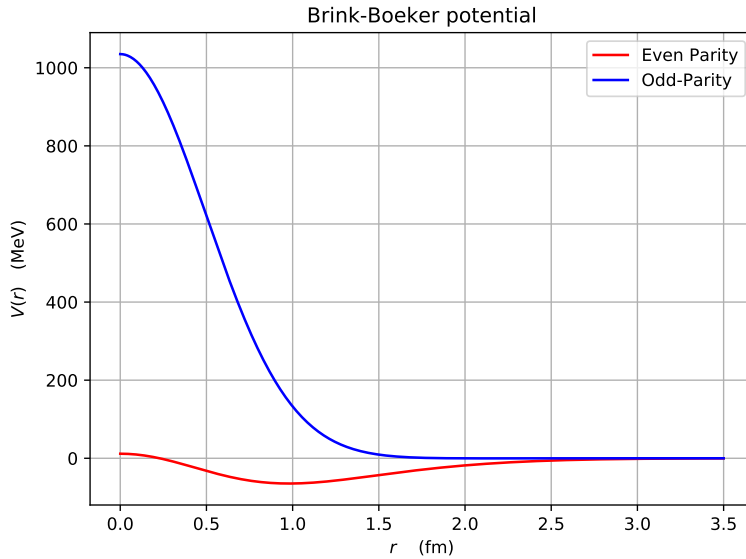


Figura 1: Perfil del potencial de Brink-Boeker para funciones de onda pares e impares. Parámetros empleados en el cálculo y extraídos de [5]

Para evaluar el elemento de matriz, antisimetrizamos de la misma forma que en (20) y expresamos las funciones de onda en el esquema LS (empleando los coeficientes 9j), sobre las cuales podemos aplicar la transformación de Moshinsky (41) para la parte radial y obtener directamente la contribución de los operadores de intercambio.

$$\langle ab(JT)|V^{BB}|cd(JT)\rangle_{as} = \langle ab(JT)|V^{BB}|cd(JT)\rangle + (-)^{j_c+j_d-J-T} \langle ab(JT)|V^{BB}|dc(JT)\rangle \quad (46)$$

donde el elemento sin antisimetrizar es

$$\begin{aligned} & \langle ab(JT)|V^{BB}|cd(JT)\rangle = \\ & \sum_{LS} (2S+1)(2L+1) \sqrt{(2j_a+1)(2j_b+1)(2j_c+1)(2j_d+1)} \left\{ \begin{matrix} l_a & 1/2 & j_a \\ l_b & 1/2 & j_b \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_c & 1/2 & j_c \\ l_d & 1/2 & j_d \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \times \quad (47) \\ & \sum_{i=1,2} \langle n_a l_b n_b l_b(L) || e^{-(r/\mu^i)^2} || n_c l_c n_d l_d(L) \rangle \left[V_W^{(i)} + (-1)^L V_M^{(i)} + (-1)^S V_B^{(i)} + (-1)^T V_H^{(i)} \right] \end{aligned}$$

Si al potencial de la forma (45) se le añade un término dependiente de la densidad y otro de espín-órbita, conforma la denominada **interacción de Gogny**. Esta interacción nuclear proporciona una descripción muy buena de propiedades globales como las energías de ligadura y radios en toda la tabla de núcleos y se usa en la actualidad ampliamente en los cálculos de estructura nuclear.

Además, una de las propiedades más prácticas de las interacciones gaussianas es que una gran cantidad de interacciones nucleares a dos cuerpos (incluyendo las más realistas) podrían desarrollarse como suma de gaussianas y, empleando las expresiones de este capítulo, se podrían encontrar entonces sus elementos de matriz a dos cuerpos.

4. Fuerzas no centrales

Por definición, las fuerzas no centrales son aquellas que no dependen solo de la distancia internucleónica, espacialmente, son potenciales de la forma $V(\vec{r})$ en lugar de $V(r)$. Las fuerzas no centrales se caracterizan por permitir transiciones entre estados de diferente momento angular, las funciones de onda resultantes de estas interacciones poseen una mezcla de estados l .

Hay dos interacciones importantes de este tipo, cuya existencia se dedujo de la información experimental y son **el potencial Tensor y la interacción espín-órbita**. Serán enunciadas en los siguientes dos puntos, así como una expresión para la obtención de sus elementos de matriz.

4.1. Interacción de acoplamiento espín-órbita

La interacción a dos cuerpos de tipo espín-órbita viene dada por el potencial:

$$V_{LS} = V_{LS}(r) \vec{l} \cdot \vec{S} \quad (48)$$

donde \vec{l} es el momento angular orbital relativo y \vec{S} es la suma de los operadores de espín (que actúan como tensores de rango 1):

$$\vec{l} = (\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \times (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) = \vec{r} \times \vec{p} \quad \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \quad (49)$$

Cuyo el elemento de matriz puede obtener en el esquema LSJ, empleando el teorema de Wigner-Eckart y el álgebra de los tensores de Racah [4], tras lo cual resulta:

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_{12} \lambda S J M | V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} \cdot \mathbf{S}^{(1)} | \alpha'_{12} \lambda' S' J M \rangle = \\ & \times \left\{ (-)^{S+J+\lambda'} W(S \lambda S' \lambda' | J 1) \langle \alpha_{12} \lambda || V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} || \alpha'_{12} \lambda' \rangle \langle \alpha_{12} S || \mathbf{S}^{(1)} || \alpha'_{12} S' \rangle \right\} \end{aligned} \quad (50)$$

Donde W denota los coeficientes de Racah y α_{12} los números cuánticos en el sistema de dos partículas $\alpha_{12} \equiv [n_1 l_1 n_2 l_2; s_1 = s_2 = 1/2]$. El término en \mathbf{l} se puede evaluar empleando la transformación de Brody-Moshinsky(35). Tal y como se puede encontrar en la referencia [1], el elemento reducido de matriz transformado al sistema del centro de masas es:

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1 n_2 l_2 (\lambda) || V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} || n'_1 l'_1 n'_2 l'_2 (\lambda') \rangle = \\ & \sum_{\substack{n l N L \\ n' l' N' L'}} \langle n_1 l_1 n_2 l_2 | n l N L \rangle \langle n' l' N' L' | n'_1 l'_1 n'_2 l'_2 \rangle \langle n l N L (\lambda) || V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} || n' l' N' L' (\lambda') \rangle \\ & \langle n l N L (\lambda) || V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} || n' l' N' L' (\lambda') \rangle = \\ & (-)^{L+l'+\lambda+1} \sqrt{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} W(l l' \lambda \lambda' | 1 L') \delta_{ll'} \delta_{NN'} \delta_{LL'} \langle n l || V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} || n' l' \rangle \end{aligned} \quad (51)$$

Sabiendo que $\langle l || \mathbf{l}^2 || l' \rangle = \delta_{ll'} l(l+1)(2l+1)$ y aplicando la transformación (42) con (117), obtenemos el resultado final:

$$\langle n l || V_{LS}(r) \mathbf{l}^{(1)} || n' l' \rangle = \delta_{ll'} \sqrt{l(l+1)(2l+1)} \langle n l || V_{LS}(r) || n' l' \rangle = \delta_{ll'} \sqrt{l(l+1)(2l+1)} \sum_p B(n l n' l'; p) I_p \quad (52)$$

Como se demuestra en [2], el elemento de matriz únicamente es no nulo para el estado triplete de espín ($S=S'=1$), aplicando esta condición, el primer coeficiente de Racah impone la condición triangular sobre las cantidades $(\lambda, \lambda', S = 1)$. Se requiere también la condición de conservación de la energía (36), las condiciones de dependencia para los índices son:

$$|\lambda - 1| \leq \lambda' \leq \lambda + 1 \quad n' = (n'_1 + n'_2) - (n_1 + n_2) + \frac{1}{2} \underbrace{(l'_1 + l'_2 - l_1 - l_2)}_{par} + n \quad (53)$$

El elemento de matriz de \mathbf{S} se puede evaluar (previo desacoplamiento en S) directamente:

$$\left\langle \frac{1}{2} \frac{1}{2} S | \mathbf{S}^{(1)} | \frac{1}{2} \frac{1}{2} S' \right\rangle = (-)^{S+1} \sqrt{(2S+1)(2S'+1)} \delta_{SS'} W \left(\frac{1}{2} \frac{1}{2} S S'; 1 S' \right) \underbrace{\left\langle \frac{1}{2} | \frac{\sigma_1 + \sigma_2}{2} | \frac{1}{2} \right\rangle}_{\sqrt{6}} \quad (54)$$

Donde, según la referencia [1], el elemento es no nulo solo para el estado triplete de espín δ_{S1} .

4.2. Potencial Tensor

La componente tensor aparece como una combinación posible de productos escalares de las variables \vec{r} , $\vec{\sigma}$ y $\vec{\tau}$, con el fin de construir un potencial local y escalar para la interacción nuclear. El verdadero descubrimiento y el motivo original de su introducción fue la observación de un momento cuadrupolar no nulo en el estado fundamental del Deuterón, lo cual implicaba una mezcla de estados S y D.

Como indique en (12) El operador tensor S_{12} corresponde a la parte no central de la interacción (12). Es un escalar en el espacio combinado de coordenadas y de espín y puede separarse como el producto de dos operadores tensoriales (uno sobre cada espacio) de rango 2. Está definido de forma que su promedio angular sea nulo.

$$S_{12} = \frac{3}{r^2}(\sigma_1 \cdot r)(\sigma_2 \cdot r) - \sigma_1 \cdot \sigma_2 = \sqrt{\frac{24\pi}{5}} \mathbf{Y}^{(2)}(\hat{r}) \cdot (\sigma_1 \times \sigma_2)^{(2)} \quad (55)$$

En lugar de reproducir el esquema del cálculo anterior para la interacción espín-órbita. Me remito a enunciar los resultados de las referencias [1] [2], en los cuales se expresa S_{12} en función de un tensor de Racah irreducible de orden 2, denotado por $\mathbf{T}^{(2)}$, cuya componente $m = 0$ es

$$T_0^{(2)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(3S_z^2 - S^2) \quad (56)$$

donde \vec{S} viene dada por (49). La definición del potencial tensor viene dada por:

$$V_T(r)S_{12} = \sqrt{\frac{32\pi}{5}} V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)}(\hat{r}) \cdot \mathbf{T}^{(2)} \quad (57)$$

Procediendo de manera análoga al caso anterior, tenemos

$$\begin{aligned} & \langle \alpha_{12} \lambda S J M | \sqrt{\frac{32\pi}{5}} V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)}(\hat{r}) \cdot \mathbf{T}^{(2)} | \alpha'_{12} \lambda' S' J M \rangle = \times \\ & \sqrt{\frac{32\pi}{5}} \left\{ (-)^{S+J+\lambda'} W(S \lambda S' \lambda' J 2) \langle \alpha_{12} \lambda || V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)} || \alpha'_{12} \lambda' \rangle \langle \alpha_{12} S || \mathbf{T}^{(2)} || \alpha'_{12} S' \rangle \right\} \end{aligned} \quad (58)$$

Donde, aludiendo al resultado deducido en [2], el término en $\mathbf{T}^{(2)}$ es no nulo solo para el triplete de espín, en el cual vale:

$$\langle S = 1 || \mathbf{T}^{(2)} || S' = 1 \rangle = \sqrt{15} \quad (59)$$

El elemento $\mathbf{Y}^{(2)}$ se obtiene aplicando la transformación de Moshinsky y desacoplando para llegar a los elementos de matriz reducidos resolubles.

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1 n_2 l_2 (\lambda) || V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)} || n'_1 l'_1 n'_2 l'_2 (\lambda') \rangle = \\ & \sum_{\substack{n l N L \\ n' l' N' L'}} \langle n_1 l_1 n_2 l_2 | n l N L \rangle \langle n' l' N' L' | n'_1 l'_1 n'_2 l'_2 \rangle \langle n l N L (\lambda) || V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)} || n' l' N' L' (\lambda') \rangle \\ & \langle n l N L (\lambda) || V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)} || n' l' N' L' (\lambda') \rangle = \\ & (-)^{\lambda+2} \sqrt{(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} W(l l' \lambda \lambda' 2 L') \delta_{l l'} \delta_{N N'} \delta_{L L'} \langle n l || V_T(r) \mathbf{l}^{(1)} || n' l' \rangle \end{aligned} \quad (60)$$

El elemento en $\mathbf{Y}^{(k)}$ se encuentra en (30), aplicando la transformación (42) con (117)

$$\langle n l || V_T(r) \mathbf{Y}^{(2)} || n' l' \rangle = \sqrt{\frac{5(2l+1)}{4\pi}} \begin{bmatrix} l & 2 & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \sum_p B(n l n' l'; p) I_p \quad (61)$$

Considerando $S=S'=1$, el primer coeficiente de Racah impone la condición triangular sobre las cantidades $(\lambda, \lambda', 2)$, además, el último Clebsch-Gordan es la condición de paridad de estos coeficientes, por lo que limita

$$\begin{aligned} & |\lambda - 2| \leq \lambda' \leq \lambda + 2 \quad l' = l, l \pm 2 \\ & n' = (n'_1 + n'_2) - (n_1 + n_2) + \frac{1}{2} \underbrace{(l'_1 + l'_2 - l_1 - l_2)}_{par} + n \end{aligned} \quad (62)$$

5. Interacciones esquemáticas, los elementos de matriz de la Surface Delta Interaction (SDI)

Las interacciones esquemáticas están diseñadas para describir aspectos de las fuerzas realistas de una forma muy sencilla. Estas interacciones, cuando se usan en un cierto espacio de valencia truncado con los parámetros ajustados, pueden reproducir muchas propiedades nucleares observadas. En el apartado anterior vimos la interacción de Brink-Boecker, la cual es un ejemplo; en este caso voy a presentar la Surface Delta Interacción (SDI), así como su variante, Modified Surface Delta Interacción (SDI). El contenido lo he extraído de las referencias [6], [4] y [24].

Estas interacciones esquemáticas plantean un potencial en el que los nucleones solo interaccionan cuando se encuentran en el mismo punto (conocidas por ello como *zero range forces*) de la superficie del núcleo de radio R . Donde se tiene en cuenta el efecto del isospín a través de la constante V_0^T del potencial:

$$V^{SDI}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = -V_0^T \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(r_1 - R) \quad (63)$$

Empleando la descomposición multipolar de la delta de Dirac (en coordenadas esféricas):

$$\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = 4\pi \frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_1 r_2} \sum_{\lambda \mu} Y_{\lambda}^{-\mu}(\hat{\Omega}_1) Y_{\lambda}^{\mu}(\hat{\Omega}_2) = 4\pi \frac{\delta(r_1 - r_2)}{r_1 r_2} \sum_{\lambda} \mathbf{Y}^{\lambda}(\hat{\Omega}_1) \cdot \mathbf{Y}^{\lambda}(\hat{\Omega}_2) \quad (64)$$

Lo cual corresponde a una descomposición multipolar del potencial, como vimos en la Sección 3.1, expresada por (18, 21) y con una componente radial de la forma (22) y otra angular que se puede obtener por (23). La ventaja de que la parte radial no dependa del orden λ es que esta serie es resoluble. Antisimetrizando el elemento de matriz por (20), la solución se expresará como

$$\begin{aligned} \langle ab(JT) | V^{SDI} | cd(JT) \rangle_{as} &= v_{abcd}^{JT} + (-)^{j_c+j_d-J-T} v_{abdc}^{JT} \\ v_{abcd}^{JT} &= -V_0^T R_{abcd} \Phi_{abcd}^J \end{aligned} \quad (65)$$

El coeficiente R_{abcd} , contiene la integral de la parte radial, que se obtiene inmediatamente por la delta.

$$\begin{aligned} R_{abcd} &= \int_0^\infty r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2 \mathcal{R}_{n,l(a)}(r_1) \mathcal{R}_{n,l(b)}(r_2) \left(\frac{\delta(r_1 - R) \delta(r_2 - R)}{r_1 r_2} \right) \mathcal{R}_{n,l(c)}(r_1) \mathcal{R}_{n,l(d)}(r_2) = \\ &= R^2 \mathcal{R}_{n,l(a)}(R) \mathcal{R}_{n,l(b)}(R) \mathcal{R}_{n,l(c)}(R) \mathcal{R}_{n,l(d)}(R) \end{aligned} \quad (66)$$

Esta cantidad depende de las funciones de oscilador en el punto R de la superficie pero se puede simplificar todavía más haciendo una aproximación. Asumiendo que el valor absoluto de estas funciones en la superficie varía muy poco con respecto a n y a l , y que R es lo suficientemente grande para que podamos asumir que todos los nodos se han producido en el intervalo $r < R$. Las funciones de onda en R se reducen a una constante más la fase que adquiere la función radial de oscilador en el límite $r \rightarrow \infty$.

$$\mathcal{R}_{nl}(R) = (-)^n |\mathcal{R}_{nl}(R)| \approx (-1)^n G_R$$

Asumiendo la misma constante G_R para las cuatro funciones. Si incluimos la constante del potencial, la parte radial del elemento de matriz, que depende de las cantidades desconocidas R y V_0^T , se puede reducir a unos parámetros A_0 y A_1 , con el fin de comparar los cálculos con la literatura [6], donde se aplicaría el cambio $A_T = 4V_0^T G_R^4$.

$$R_{abcd} \approx -(-)^{n_a+n_b+n_c+n_d} V_0^T G_R^4 = -\frac{1}{4} A_T (-)^{n_a+n_b+n_c+n_d} \quad (67)$$

Para la parte angular hay que desarrollar la serie de los armónicos esféricos sobre las funciones de onda acopladas a dos cuerpos.

$$\begin{aligned} \Phi_{abcd}^J &= 4\pi \frac{\begin{bmatrix} J & 0 & J \\ M & 0 & M \end{bmatrix}}{\sqrt{2J+1}} \sum_{\lambda} \langle ab(J) | \mathbf{Y}^{\lambda}(\hat{\Omega}_1) \cdot \mathbf{Y}^{\lambda}(\hat{\Omega}_2) | cd(J) \rangle = \\ &= 4\pi (-)^{j_b+j_c+J} \sum_{\lambda} \left\{ \begin{matrix} j_a & j_b & J \\ j_d & j_c & \lambda \end{matrix} \right\} \langle j_a | \mathbf{Y}^{\lambda}(\hat{\Omega}_1) | j_c \rangle \langle j_b | \mathbf{Y}^{\lambda}(\hat{\Omega}_2) | j_d \rangle \end{aligned} \quad (68)$$

Donde la obtención de los elementos reducidos en el último paso ya lo hemos visto en (26), el símbolo $6j$ puede eliminarse junto con el sumatorio haciendo uso de identidades especiales para los símbolos $3j$ y $6j$.

Y la parte angular (que será no nula solo si $l_a + l_b + l_c + l_d$ es par) finalmente es :

$$\Phi_{abcd}^J = -\frac{1}{2} \left(\frac{1 + (-1)^{l_a+l_b+l_c+l_d}}{2} \right) \sqrt{(2j_a+1)(2j_b+1)(2j_c+1)(2j_d+1)} \times \left\{ (-1)^{j_b+j_d+l_a+l_c} \begin{pmatrix} j_a & j_b & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & j_d & J \\ \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} j_a & j_b & J \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & j_d & J \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & -1 \end{pmatrix} \right\} \quad (69)$$

Añadiendo esto a la expresión antisimetrizada, los **elementos de matriz de la interacción SDI** [6] finalmente vienen dados por:

$$\begin{aligned} \langle ab(JT) | V^{SDI} | cd(JT) \rangle_{as} &= R_{abcd} [A_T] \mathcal{N}_{ab}(JT) \mathcal{N}_{cd}(JT) \\ &\quad (1 + (-1)^{l_a+l_b+l_c+l_d}) \sqrt{(2j_a+1)(2j_b+1)(2j_c+1)(2j_d+1)} \\ &\quad \left\{ (1 + (-1)^T) \begin{pmatrix} j_a & j_b & J \\ 1/2 & 1/2 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & j_d & J \\ 1/2 & 1/2 & -1 \end{pmatrix} - \right. \\ &\quad \left. - (-1)^{l_c+l_d+j_b+j_d} (1 - (-1)^{l_c+l_d+J+T}) \begin{pmatrix} j_a & j_b & J \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_c & j_d & J \\ 1/2 & -1/2 & 0 \end{pmatrix} \right\} \quad (70) \end{aligned}$$

Pero además de tener una solución analítica, la interacción SDI abstrae ciertos aspectos físicos; puede describir propiedades y fenómenos nucleares y, aunque son solo una primera aproximación, pueden aportar resultados realistas. La interacción SDI supone que los nucleones interactúan de forma puntual y únicamente en la superficie, lo cual no es absolutamente cierto; pero sí representa el hecho de que los nucleones interaccionan más cuanto menor es su energía cinética relativa, cosa que ocurre en la superficie del núcleo. Es por ello que la SDI reproduce cualitativamente el comportamiento de scattering nucleón-nucleón y con ello también los esquemas de niveles (bajo ciertas condiciones como el ajuste de los parámetros involucrados y el espacio de valencia que se emplea).

5.1. Modified Surface Delta Interaction (MSDI)

Cuando comparamos los resultados de la SDI con los espectros experimentales, aparecen ciertas discrepancias, en las cuales los estados $T = 0$ y $T = 1$ aparecen desviados respecto al valor medio, ponderado por $2J + 1$ ⁷, de las energías [24], también conocido como centroide:

$$\bar{E}(T) = \frac{\sum_J (2J+1) E(JT)}{\sum_J (2J+1)} \quad (71)$$

Además, las energías de ligadura predichas por la SDI no reproducen adecuadamente a las experimentales. El desacuerdo puede solucionarse añadiendo al elemento $\langle ab(JT) | V^{SDI} | cd(JT) \rangle$ dos términos lineales, uno de ellos dependiente del estado de isospín:

$$V^{MSDI}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = V^{SDI}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + B(\tau(1) \cdot \tau(2)) + C \quad (72)$$

Estos nuevos elementos son constantes en el espacio de coordenadas y por tanto, solo contribuyen sobre los elementos de matriz a dos cuerpos diagonales $|a b\rangle = |c d\rangle$ con:

$$\langle B(\tau(1) \cdot \tau(2)) + C \rangle_T = \begin{cases} -3B + C & \text{para } T = 0 \\ B + C & \text{para } T = 1 \end{cases} \quad (73)$$

Esta modificación *ad hoc* no afecta a las funciones de onda de la interacción SDI, pero sí desplaza las energías de los estados ya calculados en función de T . Sustituyendo, por comodidad, $B_0 = (-3B + C)G_R^4$ y $B_1 = (B + C)G_R^4$ y antisimetrizando obtenemos el **elemento de matriz de la interacción MSDI** [6].

$$\begin{aligned} \langle a b; JT | V^{MSDI} | c d; JT \rangle_{as} &= \langle a b; JT | V^{SDI} | c d; JT \rangle_{as} + \\ &\quad + (B_1 \delta_{T1} + B_0 \delta_{T0}) \left(\frac{\delta_{ac} \delta_{bd} + (-1)^{j_c+j_d+J+T} \delta_{ad} \delta_{bc}}{1 + \delta_{ab}} \right) \quad (74) \end{aligned}$$

⁷ El peso $2J + 1$ tiene en cuenta la degeneración en M.

6. Elementos de matriz asociados con un espacio de valencia

En los núcleos ligeros, los cierres de capa de oscilador armónico determinan espacios de valencia, las interacciones en dichos espacios se han descrito ajustando, por mínimos cuadrados, los datos espectroscópicos de núcleos en ese rango.

El proceso de obtención consiste en un procedimiento iterativo en el que se diagonaliza y obtienen las energías teóricas E_i de un Hamiltoniano, definido como una combinación lineal de parámetros (inicialmente arbitrarios). Y continúa hasta que el cuadrado de la diferencia entre las energías teóricas y las experimentales no rebasa una determinada tolerancia ϵ (similar al método de regresión lineal o de χ^2).

$$\sum_{i \in data} (E_i - E_i^{exp})^2 \leq \epsilon$$

La reproducción de propiedades nucleares es satisfactoria por este motivo. me limito aquí a enunciar las que usaré en el trabajo e indicar su correspondiente espacio de valencia:

1. **Interacción Cohen-Kurath (cki)**[9], para la capa mayor de oscilador P, la cual comprende núcleos desde $A = 4$ a $A = 16$, es decir, en un rango entre el ^4He y el ^{16}O . La interacción posee en 15 elementos de matriz no nulos (diez de ellos diagonales).
2. **Interacción USD**, para la capa SD, descrita por Brown y Wildenthal [10], comprende núcleos entre el ^{16}O y el ^{40}Ca ($16 \leq A \leq 40$). En este caso, se tienen 63 elementos de matriz no nulos, de los cuales 28 son diagonales y 35 no diagonales.
3. Para la capa PF tenemos la interacción **KB3G** [11], y la **GXPf1** [12], aunque solamente usaré la primera. Son aplicables a núcleos en el intervalo $40 \leq A \leq 80$ o bien entre el ^{40}Ca y el ^{80}Zr . En este caso se trata de 195 elementos de matriz no nulos. Ambas fuerzas proveen resultados similares en los núcleos mas ligeros, pero difieren en varios casos de núcleos ricos en neutrones (para los cuales está más enfocada la GXPf1).
No obstante, en la evaluación de estas interacciones se lleva a cabo un cálculo de renormalización de la interacción nucleón-nucleón libre, por lo que el ajuste con los datos toma un papel complementario.
4. Para núcleos más pesados existen otras interacciones y espacios de valencia que están determinados por los cierres de oscilador más la interacción de espín-órbita.

Estos tipos de interacción han sido desarrollados y en la actualidad, existen diferentes variantes. La obtención de estos elementos no solo se limita al ajuste directo con datos experimentales, sino que consideran además potenciales efectivos en su evaluación, los cuales se complementan con la regresión experimental.

Por ejemplo, para la interacción de Kuo-Brown, predecesora de la KB3G, los elementos de matriz consisten en una renormalización del potencial de Hamada-Johnston para las interacciones nucleón-nucleón desnudas. Los elementos resultantes también son ajustados con valores experimentales. La interacción KB3, plantea modificaciones en término monopolar⁸ de está interacción.

⁸ Los elementos de matriz a dos cuerpos de las interacciones efectivas definidas por (1) se pueden descomponer en dos Hamiltonianos con una mayor interpretación física: la componente monopolar y la multipolar.

- El Hamiltoniano monopolar contiene todos los términos que contribuyen al campo medio esférico (Hartree-Fock), y por tanto es responsable de las propiedades globales de saturación y de la evolución de las energías de partícula independiente.
- Por otra parte, el Hamiltoniano multipolar contiene la suma, sobre todas las posibilidades del espacio de valencia, del producto escalar de dos operadores de creación/aniquilación de dos estados de partícula acoplados a un momento total, donde una de sus componentes más relevantes es el Pairing y el cuadrupolo.

Parte II

Aplicación de los elementos de matriz en cálculos de estructura nuclear.

Ahora que hemos introducido formalmente las interacciones a dos cuerpos, es el momento de emplearlos para predecir propiedades nucleares; principalmente espectros y energías de estado fundamental. Para ello emplearé, dos tipos diferentes de cálculos nucleares, la diagonalización directa y el método de campo medio autoconsistente.

7. Los métodos de campo medio

Los métodos de campo medio no resuelven el problema de forma exacta, sino que buscan dentro de un espacio variacional de funciones de onda de muchos cuerpos la solución de menor energía. El proceso emplea las propias funciones de onda para construir el campo con respecto al cual interacciona el nucleón restante, por lo que las soluciones son autoconsistentes y debe iterarse hasta alcanzar la convergencia.

Los métodos más importantes de este tipo son: El método Hartree-Fock esférico (HF); el modelo BCS (Bardeen-Copper-Schrieffer) y el método de Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB), que unifica los dos primeros.

El planteamiento consiste en proponer un espacio variacional \mathfrak{F} de funciones de onda prueba y definir el funcional sobre $|\Phi\rangle$, el cual corresponde al valor esperado de la energía:

$$|\Phi\rangle \in \mathfrak{F} \quad \rightarrow \quad E_{|\Phi\rangle} = \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (75)$$

Y minimizar la energía hallando el $|\Phi\rangle$ óptimo

$$\delta (E_{|\Phi\rangle})_{|\Phi\rangle=|\Phi_0\rangle} = 0 \quad (76)$$

El espacio de funciones de onda de muchos cuerpos más sencillo son los determinantes de Slater, que son productos de funciones de onda de una partícula (HF) o de una cuasipartícula (BCS y HFB). Después, reducimos el Hamiltoniano (1) a la suma de un término a un cuerpo H_{CM} (más una constante) que constituirá la interacción con el campo promedio generado por los nucleones; y un término de interacción a dos cuerpos H_{res} , el cual se desprecia en esta aproximación.

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H}_{CM} + \cancel{\hat{H}_{res}} \quad \hat{H}_{CM} = E_0 + \sum_i \epsilon_i a_i^\dagger a_i \quad (77)$$

Donde a_i^\dagger son operadores a un cuerpo asociados al espacio de partículas/cuasipartículas y ϵ_i .

Siempre que la convergencia sea posible obtendremos una solución que reproduce muy bien la energía de ligadura del núcleo. No obstante, estos métodos no respetan las simetrías en general y las funciones de onda resultantes no tienen buenos números cuánticos. La restauración de estas simetrías constituye el siguiente paso en la obtención de una solución más allá del campo medio.

7.1. El Método Hartree-Fock-Bogolyubov

Las teorías Hartree-Fock (HF) y BCS son las precursoras del formalismo Hartree-Fock-Bogolyubov (HFB). De forma resumida, consisten en formalismos que buscan minimizar la energía en un espacio de funciones de onda de partículas (HF) y de cuasipartículas (BCS). La teoría de HF tiene en cuenta las correlaciones de largo alcance debidas al campo medio generado por el núcleo en conjunto mientras que la teoría BCS fue introducida para describir la interacción de apareamiento que experimentan los nucleones cerca del nivel de Fermi.

La teoría de **Hartree-Fock-Bogolyubov** sintetiza estos métodos y con ella encontraremos una mejor aproximación a la función de onda exacta dentro del esquema del campo medio, ya que incluye más correlaciones que los anteriores métodos por separado. El contenido de esta sección está extraído y resumido de los manuales [15], [18] y [17].

7.1.1. La Transformación de Bogolyubov, la matriz densidad y tensor de apareamiento

El concepto básico de los operadores de cuasipartículas es definir el estado fundamental a muchos cuerpos de la aproximación HFB como un vacío con respecto a las cuasipartículas:

$$\beta_k |\Phi\rangle = 0 \quad (78)$$

$$|\Phi\rangle = \prod_{i=1}^N \beta_i |-\rangle \quad (79)$$

Las denominadas cuasipartículas Bogolyubov se definen como una combinación lineal general entre operadores de creación y destrucción de partículas:

$$\beta_k^\dagger = \sum_j U_{j,k} c_j^\dagger + V_{j,k} c_j \quad (80)$$

Estos nuevos operadores β_k, β_k^\dagger satisfacen también las reglas de anticonmutación (3). Sujetos a estas relaciones, las matrices U y V se corresponden con los parámetros variacionales de la teoría.

Antes de aplicar el principio variacional, conviene definir los elementos de **matriz densidad y tensor de apareamiento** como promedios a los operadores creación/destrucción sobre el vacío de cuasipartículas, en términos de los parámetros U y V son:

$$\rho_{ab} = \langle \Phi | c_b^\dagger c_a | \Phi \rangle = \sum_l V_{bl} V_{al}^* = (V^* V^T)_{ab} \quad (81)$$

$$\kappa_{ab} = \langle \Phi | c_b c_a | \Phi \rangle = \sum_l U_{bl} V_{al}^* = (V^* U^T)_{ab} \quad (82)$$

donde además $\langle \Phi | c_a^\dagger c_b^\dagger | \Phi \rangle = \kappa_{ba}^* = \kappa_{ab}^\dagger$. Su utilidad es reducir los promedios sobre los operadores \hat{H} y \hat{N} a operaciones matriciales sencillas.

Estas dos transformaciones demuestran que el valor esperado de un operador arbitrario evaluado sobre las funciones $|\Phi\rangle$ podrá reducirse a términos de ρ y κ aplicando sucesivamente el teorema de Wick. También permitirán evaluar explícitamente las ecuaciones HFB en función de los parámetros variacionales U y V , ya que ahora, ρ y κ sí nos permiten definir unívocamente la función de onda $|\Phi\rangle$.

7.1.2. Las ecuaciones de HFB

Como ocurre en el caso de la teoría BCS, las funciones de onda producto construidas sobre las cuasipartículas violan la simetría asociada al número de partículas y por ello no son autoestados del operador número. Por eso, tenemos que restringir el espacio variacional al conjunto de funciones de onda cuyo valor esperado del operador número sea el de nuestro núcleo.

$$N = \langle \Phi | \hat{N} | \Phi \rangle \quad (83)$$

Las restricciones de las funciones de onda se aplican al Hamiltoniano como **ligaduras** en las que determinamos los **multiplicadores de Lagrange** imponiendo las condiciones de nuestro sistema. Esto se puede generalizar a otras magnitudes, cada condición adicional requiere introducir con otro multiplicador más, de forma que fijemos el valor esperado del operador asociado sobre $|\Phi(\vec{q})\rangle$ fijando una coordenada generalizada \vec{q} en la función de onda.

Cada ligadura debe tener asociado un multiplicador de Lagrange; para mantener el número de partículas constante, el multiplicador deberá ser el **potencial químico** λ_N .

$$\hat{H}' = \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_{Q_\mu} \hat{Q}_\mu - \dots \quad (84)$$

donde \hat{Q}_μ es el operador asociado a la coordenada generalizada q_μ . Por el principio variacional, la solución $|\Phi(\vec{q})\rangle$ deberá minimizar el funcional

$$E' [|\Phi(q)\rangle] = \frac{\langle \Phi(q) | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_{Q_\mu} \hat{Q}_\mu | \Phi(q) \rangle}{\langle \Phi(q) | \Phi(q) \rangle} \quad (85)$$

Para calcular el funcional (85) evaluamos el promedio de los operadores \hat{H} y \hat{N} (en la base c/c^\dagger) sobre una función producto $|\Phi\rangle$ construida sobre el vacío de cuasipartículas, expresando el valor esperado de los operadores como matrices ρ y κ . El valor esperado de la energía cinética es la traza de la matriz t_{ab} de (1) con la matriz

densidad. El promedio del potencial a dos cuerpos se expresa en términos del tensor apareamiento y del operador densidad, los cuales aparecen como resultado tras las contracciones:

$$\langle \Phi | V | \Phi \rangle = \frac{1}{4} \sum_{abcd} \bar{v}_{abcd} \langle \Phi | c_a^\dagger c_b^\dagger c_d c_c | \Phi \rangle = \dots = \frac{1}{4} \sum_{abcd} \bar{v}_{abcd} (\kappa_{ab}^* \kappa_{cd} - \rho_{da} \rho_{cb} + \rho_{db} \rho_{ca}) \quad (86)$$

Definimos el elemento **campo Hartree-Fock** Γ que aparece en el estudio de HF, y un nuevo **campo de apareamiento** Δ :

$$\Gamma_{ac} = \sum_{b,d} \bar{v}_{abcd} \rho_{db} \quad \Delta_{ab} = \frac{1}{2} \sum_{c,d} \bar{v}_{abcd} \kappa_{cd} \quad (87)$$

Con esto, la expresión del promedio del potencial se reduce a:

$$\langle \Phi | V | \Phi \rangle = \frac{1}{2} \sum_{ab} \Delta_{ab} \kappa_{ab}^+ + \frac{1}{2} \sum_{ac} \Gamma_{ac} \rho_{ca} = \underbrace{\frac{1}{2} \text{Tr}(\Delta \kappa^+)}_{E_{\text{Pairing}}} + \underbrace{\frac{1}{2} \text{Tr}(\Gamma \rho)}_{E_{\text{HF}}} \quad (88)$$

Y con ella, la energía de Hartree-Fock-Bogolyubov (junto a la debida al promedio del número de partículas que es la que se evalúa variacionalmente) corresponde a la suma de la energía cinética, la energía de Hartree-Fock y la energía de apareamiento:

$$E^{HFB} = \text{Tr}(t\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Gamma\rho) + \frac{1}{2} \text{Tr}(\Delta\kappa^+) = E_0 \quad (89)$$

Para realizar las variaciones, el Hamiltoniano debe expresarse en la base de cuasipartículas, dando un sistema de ecuaciones son no lineales se resuelven de forma autoconsistente diagonalizando sucesivamente o por medio del **método de del gradiente**, que es especialmente útil cuando hay varias ligaduras adicionales.

El método del gradiente parte del teorema de Thouless [15] [19], y consiste en variar los parámetros variacionales en la dirección en la que el gradiente de la energía ∇E es máximo, manteniéndose en la región del espacio variacional donde las funciones de onda de muchos cuerpos mantienen las ligaduras.

Como solución al problema variacional se obtienen las funciones de onda de campo medio con las ligaduras ($|\Phi\rangle \rightarrow |\Phi_{HFB}(N, q)\rangle$), y con ellas podemos evaluar los valores esperados de diferentes observables físicos. En nuestro caso no restringiremos más que la conservación del valor medio de las partículas, pero es posible describir superficies de energía dando diferentes valores a las magnitudes restringidas q , como por ejemplo el momento cuadrupolar (relacionado con la deformación del núcleo).

$$E^{HFB}(N, q) = \frac{\langle \Phi_{HFB}(N, q) | \hat{H} | \Phi_{HFB}(N, q) \rangle}{\langle \Phi_{HFB}(N, q) | \Phi_{HFB}(N, q) \rangle} \quad (90)$$

En el estado fundamental HFB, se cumplirá que $\beta_k |\Phi\rangle = 0$, quedando solo las constantes H_0 y N_0 que se agrupan en la expresión $E' = E^{HFB} - \lambda \text{Tr}(\rho)$.

7.2. Ruptura y Restauración de las simetrías

En física, la simetría de un sistema se exhibe como una propiedad que se preserva bajo la transformación de dicha simetría. Por ello, en el caso de la mecánica cuántica, los observables deben ser invariantes respecto a estas transformaciones; los autoestados, con los buenos números cuánticos, también deben heredar estos comportamientos. Es decir, si el Hamiltoniano preserva una operación de simetría S debe conmutar con el observable \hat{S} y satisfacer una ecuación de autovalores:

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad \hat{H} |\Psi^S\rangle = E |\Psi^S\rangle, \quad \hat{S} |\Psi^S\rangle = s |\Psi^S\rangle \quad (91)$$

Veremos que las teorías de campo medio no preservan, en general, las simetrías del Hamiltoniano. El motivo se debe a la no linealidad los métodos HF y HFB (se hace depender a los operadores de las funciones de onda que se buscan). Hay entonces una distinción entre la energía de campo medio (que es una aproximación razonable a la energía del estado fundamental) y las funciones de onda de campo medio, que no son autoestados del Hamiltoniano original. Además, el método permite la ruptura de simetrías para aumentar el espacio variacional manteniendo una estructura sencilla de funciones de onda prueba.

En el proceso, intentamos diagonalizar el Hamiltoniano de campo medio que depende de unas soluciones que no tenemos. Como consecuencia, las soluciones resultantes de la aproximación tienen menos simetrías que el Hamiltoniano original. Este hecho se denomina **Ruptura Espontánea de la Simetría**

El motivo por el que se rompe la simetría es, por otra parte, la razón por la que el valor de la energía se aproxima tan bien a la exacta. En los métodos variacionales, la solución al problema la voy a buscar dentro de un conjunto de funciones de onda prueba, siendo dicha solución aquella función de onda que minimiza el valor esperado de la energía. Cuanto mayor sea este conjunto de funciones de onda prueba (como ocurre en el espacio variacional formado por funciones de onda de campo medio es mucho más grande que el que la mantiene) mejor se aproximara la solución. Es por ello, que este aparente problema de la aproximación de campo medio se toma como una ventaja.

La causa de que esta ruptura de simetrías se dé en el núcleo atómico es la interacción nuclear que tiene una serie de características, especialmente su parte de correlación de largo alcance, que hace que sea favorable esta ruptura. Por este motivo, una importante fracción de los núcleos atómicos se pueden que describir por medio de un campo medio que rompe la simetría esférica, dando estados fundamentales deformados, así como en otra gran parte se rompe la simetría del número de partículas dando lugar a la superfluidez nuclear.

Estas rupturas de simetrías son consecuencia de la descripción incompleta del núcleo que da la aproximación de campo medio. Sin embargo, las soluciones exactas del problema nuclear sí preservan esas simetrías, es decir, son autoestados de los operadores del número de partículas, momento angular, etc.. Por tanto, para mejorar la aproximación de campo medio y se debería recurrir a métodos más allá de dicha aproximación para dar una descripción teórica que se acerque más, tanto a la solución exacta como a los datos experimentales.

7.3. Método de Proyección al número de partículas, Variación tras la proyección (PN-VAP).

Los métodos de proyección permiten corregir estas anomalías al aplicar sobre las funciones de onda "deformadas" $|\Phi\rangle$, de campo medio, un operador de proyección P^S que produce un autoestado del operador asociado a la simetría S (91).

$$\hat{P}^S |\Phi\rangle = |\Psi^S\rangle \quad (92)$$

Estas técnicas son un caso especial del método de la coordenada generadora (GCM), que busca diagonalizar el Hamiltoniano en un subespacio colectivo de funciones de onda $|\Phi(q)\rangle$ dependientes de parámetros continuos q . Las funciones de onda solución vienen dadas por el ansatz

$$|\Psi\rangle = \int dq f(q) |\Phi(q)\rangle \quad (93)$$

y planteamos el problema variacionalmente, minimizando la energía con la variación de $|\Psi\rangle$ respecto a las funciones de peso $f(q)$. Las ecuaciones variacionales se resuelven empleando la denominada base natural (que no depende del espacio colectivo).

En nuestro caso, aplicando los elementos del grupo de simetría $\mathcal{T}(a)$ sobre las funciones que violan la simetría $|\Phi\rangle$, generaremos un set de funciones $|\Phi(a)\rangle$ con las que construir la función de onda de la forma $|\Psi\rangle$, después, aplicaremos variaciones de esta respecto a la función peso $f(a)$.

El nuevo espacio es invariante respecto a las transformaciones $\mathcal{T}(a)$ de simetría, por lo que buscaremos una función $f(a)$ que simultáneamente minimice la energía y haga que $|\Psi\rangle$ conserve las propiedades del grupo de simetría. Para hallarla, la descompondremos sobre el conjunto de autoestados de los operadores de simetría, lo cual corresponde una descomposición de Fourier para los grupos Abelianos [16]. Donde el operador número \hat{N} se puede relacionar con un generador de rotaciones sobre el eje Z en el espacio de cuasiespín. Esta rotación se denomina *transformación de gauge* y permite representar el operador número por un ángulo ϕ . La descomposición periódica resulta:

$$f(\phi) = \frac{1}{2\pi} \sum_n g_n e^{-in\phi} \quad (94)$$

con n entero. Al introducir esta ecuación en el 93 obtenemos

$$|\Psi\rangle = \sum_n g_n \hat{P}^{2n} |\Phi\rangle \quad (95)$$

donde \hat{P}^A es un operador de proyección sobre el subespacio con número de partículas A (Además, se cumple $\hat{P}^{A2} = \hat{P}^A$ y $\hat{P}^{A+} = \hat{P}^A$).⁹

$$\hat{P}^A = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\phi e^{i\phi(\hat{N}-A)} \quad (96)$$

Dado que las funciones que proyectamos son obtenidas de un método de campo medio, la aplicación de este método reduce la energía predicha debido a que la solución se aproxima más a la exacta.

⁹Dado que buscamos la función de onda con el A apropiado, g_n es una constante $g_{A/2}$ de la forma $g_n = \delta_{2n, A} g_{A/2}$

La proyección se puede realizar antes o después de aplicar el método variacional. Si proyectamos una solución $|\Phi\rangle$ obtenida del método HFB estaremos aplicando la *proyección tras la variación* o PAV, y la solución final $|\Psi^A\rangle$ contendrá solo las componentes de $|\Phi\rangle$ con número de partículas A . Sin embargo, dado que no variamos la función proyectada, al no respetar el principio variacional (75), el campo autoconsistente no es compatible con las funciones con buenos números cuánticos.

Si **proyectamos antes** de realizar la **variación** el anterior problema se solventa. El método **PAV** utiliza el método variacional apropiadamente, obteniendo la función de onda que minimiza el valor esperado del Hamiltoniano proyectado $\hat{P}^A H \hat{P}^A$ dentro de un espacio variacional de funciones de onda.

$$\delta \left(\frac{\langle \Psi^A | \hat{H} | \Psi^A \rangle}{\langle \Psi^A | \Psi^A \rangle} \right) = \delta \left(\frac{\langle \Phi | \hat{P}^A H \hat{P}^A | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \hat{P}^A \hat{P}^A | \Phi \rangle} \right) = 0 \quad (97)$$

El método aporta mejores resultados, en nuestro caso, está introducido en un método de campo medio.

7.4. Código Taurus PN-VAP.

El código *Taurus pn-vap* [23] permite la resolución de las ecuaciones de HFB y VAP con proyección a un buen número de partículas (PN-VAP) usando elementos de matriz a dos cuerpos en espacios de valencia. Las funciones de onda de partícula independiente usadas en este código son las del oscilador armónico esférico (5) con acoplo $j = l + s$. Las ecuaciones HFB y PN-VAP se resuelven con el método del gradiente.

El programa es especialmente útil para estudiar un núcleo sometido a cualquier tipo de interacción de entre las ya mencionadas, introduciendo los elementos de matriz previamente obtenidos. Además, el programa permite aplicar diferentes ligaduras, como por ejemplo la restricción al momento cuadrupolar (para valores moderados de deformación), así se puede estudiar la energía fundamental en función de la deformación y con ello las formas nucleares.

El programa es aplicable a cálculos de núcleos ligeros-medios, en sistemas de tipo "core" o "no-core" (según se indique en los elementos de matriz), por lo que puede servir tanto para simular la dinámica de las diferentes capas respecto a las interacciones, como para evaluar la energía de ligadura de los núcleos en el segundo caso.

La restauración de la simetría del número de partículas por el método VAP emplea un proyector discreto derivado del operador integral (96) [22]

$$P^A \approx \sum_{l=0}^{N_{fom}} \exp \left(\frac{i(\hat{N} - A)l}{2N_{fom}} \right) \quad (98)$$

donde N_{fom} es el número de *puntos de Fomenko*, que representa las divisiones del intervalo 2π . Para un cálculo sin restauración de simetría $N_{fom} = 1$, y para una proyección razonable se puede emplear entre 9 y 15 puntos, disminuyendo la velocidad del programa proporcionalmente.

El programa también permite la mezcla de isospín en la transformación (80). En general, los parámetros variacionales U y V contienen términos no diagonales en el isospín que periten incluir, entre otras cosas, tanto el apareamiento de partículas idénticas (nn y pp) como de estados de protón y de neutrón (pn y np)

$$U = \begin{pmatrix} U_{pp} & U_{pn} \neq 0 \\ U_{np} \neq 0 & U_{nn} \end{pmatrix} \quad V = \begin{pmatrix} V_{pp} & V_{pn} \neq 0 \\ V_{np} \neq 0 & V_{nn} \end{pmatrix} \quad (99)$$

No obstante, en los cálculos que no mezclan los estados de protón y neutrón, las matrices $U_{pn} = U_{np}$ y $V_{pn} = V_{np}$ se fijan a cero. Esto supone que los operadores de la matriz de densidad ρ (81) y el tensor de apareamiento κ (82) sean restringidos también. Esta modificación afecta al valor del campo de Hartree Γ y del término de gap Δ (87), de forma que algunos de los elementos de matriz no se contemplarán en dichas funciones. Por tanto, la energía (89) resulta algo mayor que la evaluación completa.

Adicionalmente, los elementos de interacción \bar{v}_{abcd} tienen que respetar por otra parte la conservación del isospín entre el bra y el ket ¹⁰ (por ejemplo, elementos como $\bar{v}_{a_p b_p c_n d_n}$ ó $\bar{v}_{a_p b_p c_p d_n}$ son nulos). Los elementos no nulos son $\bar{v}_{a_p b_p c_p d_p}$, $\bar{v}_{a_p b_n c_p d_n}$, $\bar{v}_{a_n b_n c_n d_n}$, $\bar{v}_{a_n b_p c_n d_p}$ y otras combinaciones de la misma forma.

No obstante, el programa permite realizar cálculos sin mezcla de isospín. Este tipo de transformaciones son habituales en los códigos HFB que usan interacciones dependientes de la densidad como Skyrme o Gogny [20] [21]

¹⁰De lo contrario la interacción nuclear estaría teniendo en cuenta procesos de tipo desintegración β

8. Mezcla de configuraciones, la diagonalización directa

En esta sección se plantea una manera más directa para resolver el problema de muchos cuerpos, y es diagonalizar el Hamiltoniano de una determinada interacción para obtener las energías [6] [25], es decir, resolver la ecuación de Schrödinger para un sistema de muchos cuerpos.

$$H|\Psi_A\rangle = E|\Psi_A\rangle \quad (100)$$

La solución $|\Psi_A\rangle$, estado de A cuerpos, se describe como la combinación lineal de todas las configuraciones de A cuerpos construidas sobre una base ortonormal de estados. Las configuraciones corresponden a las posibles combinaciones de A cuerpos individualmente descritos por los estados de partícula independiente

$$|\Psi^A\rangle = \sum_i C_i |\psi_i^A\rangle \quad (101)$$

$$|\psi_i^A\rangle = |(\nu_1)^{(n_1^i)}(\nu_2)^{(n_2^i)} \dots (\nu_N)^{(n_N^i)}\rangle \quad A = n_1^i + n_2^i + \dots + n_N^i$$

Donde la última expresión es un determinante de Slater ¹¹ sobre un espacio de valencia de N estados, descritos por una serie de números cuánticos ν que en nuestro caso son los estados monoparticulares del oscilador armónico (5) en acoplamiento jj : $\nu_k = |n_k, l_k, j_k, \tau_k\rangle$, donde τ hace referencia a la etiqueta de protón o neutrón. Los índices n_k^i tomarían valores dentro del rango de degeneración $(2j_k + 1)$.

Para obtener el ordenamiento de los niveles de energía, debemos diagonalizar el Hamiltoniano sobre todos los estados compatibles asociados a cada nivel. Esto es, fijando un determinado estado de A cuerpos, de paridad y momento J^π , reunimos los M estados asociados con él y construimos una matriz $M \times M$ con los elementos de matriz H_{ij} para diagonalizar.

$$H_{ij} = \delta_{ij}T_{ij} + V_{ij} = \delta_{ij}\langle\psi_i^A|T|\psi_j^A\rangle^{(J^\pi)} + \langle\psi_i^A|V|\psi_j^A\rangle^{(J^\pi)} \quad |\Psi^A(J^\pi)\rangle = \sum_i^M C_i |\psi_i^A\rangle^{(J^\pi)} \quad (102)$$

El resultado son las energías de los M niveles J^π , así como los diferentes coeficientes de mezcla de configuración c_i de las funciones de onda de dichos estados.

A diferencia de los métodos de campo medio, la solución por diagonalización es exacta. El principal inconveniente de este procedimiento ocurre al aumentar el número de partículas y el espacio de valencia. Debido a la elevada degeneración, las matrices a diagonalizar tienen dimensiones numéricamente inasequibles y no es posible resolverlas.

8.1. Código Antoine.

Para obtener la solución exacta por diagonalización he empleado el código de cálculo del modelo de capas *Antoine* [29] [30] [31]. Al igual que *Taurus*, el programa toma la interacción de un archivo de elementos de matriz a dos cuerpos acoplados en momento angular e isospín, así como las energías de partícula independiente y las consideraciones de los efectos de densidad (107).

El programa implementa el **algoritmo de Lanczos**, que permite obtener de forma precisa los autovalores y autovectores más bajos sin necesidad de diagonalizar la matriz completa, lo cual corresponde en a los niveles de menor energía en los que estamos interesados. Describiré algunos de los pasos en los que se basa el método. [26]

El proceso comienza seleccionando un vector inicial aleatorio $|v_1\rangle$ de la forma (101). El resultado de aplicar el Hamiltoniano sobre él se puede expresar como una combinación lineal de dicho estado y de otro vector $|v_2\rangle$ ortogonal al primero, es decir, $H|v_1\rangle = a_1|v_1\rangle + b_1|v_2\rangle$, donde los términos a_i corresponderán a los elementos diagonales $\langle v_i|H|v_i\rangle$ y los b_i a los no diagonales $\langle v_i|H|v_{i+1}\rangle = \langle v_{i+1}|H|v_i\rangle$.

Repitiendo con $|v_2\rangle$, tendremos una combinación de $|v_1\rangle$, $|v_2\rangle$ y un nuevo vector $|v_3\rangle$ ortogonal a estos: $H|v_2\rangle = b_1|v_1\rangle + a_2|v_2\rangle + b_3|v_3\rangle$; pero $H|v_3\rangle$ ya no tendrá dependencia de $|v_1\rangle$ debido a la condición de ortogonalidad. Si proseguimos con todos los vectores posibles, hasta agotar el espacio de configuración ($b_N = 0$), obtenemos un

¹¹Mi expresión para $|\psi_i^A\rangle$ indica explícitamente la ocupación de los diferentes niveles, por lo que se puede expresar equivalentemente en segunda cuantización. La indico de esta manera por simplicidad y por que no es necesario indicar los diferentes estados individuales de tercera componente m .

sistema tridiagonal para el Hamiltoniano en la base $\{|v\rangle\}_N$:

$$H = \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & 0 & & & 0 \\ b_1 & a_2 & b_2 & 0 & & \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & b_{N-2} & a_{N-1} & b_{N-1} \\ 0 & & & 0 & b_{N-1} & a_N \end{pmatrix} \quad (103)$$

Para obtener los autovalores de H , debemos diagonalizar la matriz tridiagonal de Lanczos de forma iterativa. Dicha matriz tiene la propiedad de que los autovalores obtenidos tras diagonalizar la submatriz $n \times n$ de la esquina superior izquierda convergen a los autovalores de la matriz completa $N \times N$. Lo cual significa que los valores de las autoenergías más bajas se van a obtener mucho antes de que se obtengan las soluciones de todo el espacio de configuración.

Asumiendo un conjunto de N autofunciones $|\Psi\rangle$ de H (101), podemos expresar el vector $|v_1\rangle$ como combinación de estas:

$$|v_1\rangle = \sum_i^N (\alpha)_i^1 |\Psi_i\rangle \quad (104)$$

y los demás vectores en función de $|v_1\rangle$ por medio de la matriz tridiagonal (por ejemplo, $|v_2\rangle = (H - a_1)/b_1 |v_1\rangle$).

La diagonalización se llevará acabo aplicando el operador H sobre el vector $|v_1\rangle$, en la iteración n tendremos:

$$H^{(n)}|v_1\rangle = \sum_i^N (\alpha)_i^1 H^{(n)}|\Psi_i\rangle = \sum_i^N (\alpha)_i^1 E^{(n)}|\Psi_i\rangle \quad (105)$$

En los Hamiltonianos que describen sistemas ligados, los niveles inferiores $|\Psi\rangle$ de la ecuación anterior, con autovalores de mayor valor absoluto $|E_i|$, predominan con el paso de las iteraciones.

Los autovectores del Hamiltoniano se pueden expresar en función de los vectores $|v\rangle$, los cuales están definidos en una base de funciones del modelo de capas $|\psi\rangle$ usando (101).

$$|\Psi\rangle = \sum_{j,i} (\alpha^{-1})_j^i C_i |\psi_i\rangle \quad (106)$$

En resumen, el método de Lanczos es muy eficiente a la hora de evaluar los autovalores y autovectores más bajos de matrices de gran tamaño.

9. Aplicación de los elementos de matriz a dos cuerpos en cálculos de estructura.

En esta última parte del trabajo se usan los elementos de matriz a dos cuerpos hallados en los primeros apartados, en particular los de las interacciones SDI/MSDI, en el cálculo de la estructura de núcleos por métodos de diagonalización directa (usando *Antoine*) y métodos aproximados (usando *Taurus*). Para comprobar que los elementos de matriz se calculan correctamente con el programa desarrollado en el trabajo, han sido comparados con los resultados obtenidos en la referencia [6]. También se comparan con los resultados experimentales para dar una estimación de la capacidad predictiva de estas interacciones y métodos.

Por último, se han realizado comparaciones entre los métodos exactos y aproximados en tres regiones diferentes de núcleos ligeros en la tabla nuclear.

Consideraciones en los cálculos.

Para estos cálculos he considerado varias cuestiones; En primer lugar, supongo que los elementos de matriz respetan la **simetría e independencia de carga**, es decir, que las interacciones protón-protón, neutrón-neutrón y neutrón-protón son idénticas, sin tener en cuenta tampoco la interacción de Coulomb. Es por ello que los cálculos para núcleos espejo dan los mismos resultados al diagonalizar el hamiltoniano.

Con respecto a la interacción SDI, no hay constantes generales A_T para (67) que den de forma general niveles similares a los experimentales. Para cada cálculo se emplean los valores específicos que usaron otras fuentes para reproducirlos, los cuales se indican en cada caso. En general, si no se especifican, se suponen como $A_0 = A_1 = 1$ MeV.

Las **energías monoparticulares** de los cálculos con *core* inerte afectan a los resultados de las energías al realizar la mezcla de configuraciones. Realizaré varias simulaciones en las que compararé la interacción SDI con las interacciones *cki*, *usd* y *kb3g.a42*; pero los resultados de los elementos de matriz de la interacción esquemática no se pueden comparar con salvo que se conozcan dichas energías. En caso de no tener estos valores, las igualo al valor que aparece definido para los elementos de matriz empíricos.

Efectos de densidad e interacción con el *core* inerte.

Cuando comparamos resultados experimentales con los autoestados de un conjunto de partículas en un determinado espacio de valencia bajo una interacción, los resultados difieren sistemáticamente debido al efecto que el núcleo inerte tiene sobre los nucleones del espacio de valencia.

En este planteamiento, los nucleones que se encuentran por debajo de un cierre de capa de oscilador no interactúan con las partículas que consideramos activas, debido a que se requieren energías muy altas para su promoción. No obstante, este conjunto inerte produce un efecto de densidad, que resulta en el desplazamiento de las energías de los elementos de interacción a dos cuerpos y las energías de partícula independiente.

Las autoenergías calculadas del sistema y los valores experimentales se pueden conciliar si multiplicamos todos los elementos de matriz v_{abcd} por un factor dado por la fórmula:

$$\left(\frac{X_1}{X_2} \right)^\gamma \quad (107)$$

para un exponente γ determinado por regresión con datos experimentales, donde X_1 y X_2 corresponden a la suma

$$\begin{cases} X_1 = X_{p\ 1} + X_{n\ 1} \\ X_2 = X_{p\ 2} + X_{n\ 2} \end{cases} \leftarrow \begin{cases} X_{p\ 1} = C_\pi + \pi = Z \\ X_{n\ 1} = C_\nu + \nu = N \\ X_{p\ 2} = C_\pi + 1 \\ X_{n\ 2} = C_\nu + 1 \end{cases} \quad (108)$$

las variables que aparecen son: el número partículas en el *core* de neutrones C_ν y de protones C_π y los neutrones ν y protones π que hay en el espacio de valencia.

El factor (107) se puede aplicar o sobre las energías monoparticulares y los elementos de interacción a dos cuerpos o únicamente sobre los elementos de interacción. En la comparación de cálculos tipo *core* empleo la segunda opción, pero por defecto (es decir, si no es necesario hacer comparaciones) no aplicaré esta corrección.

9.1. Espectroscopía de núcleos con dos partículas o dos huecos en el espacio de valencia

Empleando Antoine, podemos evaluar los esquemas de niveles y comparar diferentes tipos de interacciones efectivas. Las soluciones se comparan con los resultados experimentales. El objetivo de este punto también es comprobar el que nuestros cálculos coinciden con los que se obtuvieron en la referencia [6].

Para ello, los ejemplos que se han usado están contenidos en dicha referencia y los niveles que allí se mencionan están indicados en rojo en mis gráficas, y otros niveles extra que he calculado aquí aparecen en negro.

9.1.1. Espectros en la capa P.

Los estados de partícula independiente de la capa P son el $0p_{3/2}$ y el $0p_{1/2}$, las energías de dichos niveles para el caso SDI son $\epsilon(0p_{3/2}) = 0$ y $\epsilon(0p_{1/2}) = 6$ MeV; para la parametrización descrita en la cki son $\epsilon(0p_{3/2}) = 1.63$ MeV y $\epsilon(0p_{1/2}) = 2.27$ MeV. Dichas energías no se pueden igualar debido a que la diagonalización aporta un estado fundamental diferente en cada caso.

Podemos evaluar núcleos de dos partículas ($A=6$), con los núcleos ${}^6\text{He}$, ${}^6\text{Be}$ (Figura 2) y ${}^6\text{Li}$ (Figura 3), o de dos huecos ($A=14$, es decir, el ${}^{14}\text{C}$, el ${}^{14}\text{O}$ y el ${}^{14}\text{N}$ (Ver Figura 4)) en dicho espacio de valencia. Los niveles de estos núcleos se comparan de forma relativa, y recordando que, las interacciones respetan la simetría de carga, por lo que la simulación para núcleos de dos neutrones da los mismos resultados que en el caso de dos protones. Los datos experimentales están tomados de la base IAEA-NDS [34].

En la Figura 2, la interacción SDI es cualitativamente parecida a la cki, numéricamente, el nivel $+2$ está a más del doble en la cki que en la SDI. La interacción SDI está ajustada [6] para reproducir el resultado experimenta, mientras que la cki esta ajustada globalmente a toda la capa P, por lo estas diferencias en los resultados eran esperables.

El caso del Litio es doblemente impar y por ello se presentan estados excitados con $T=0$ y $T=1$, por lo que los resultados que he calculado se pueden optimizar con la interacción MSDI (74). En la Figura 3 está adjuntado el espectro de la interacción MSDI con parámetros extraídos de [24] y ajustados para $8 \leq A \leq 16$ con un *core* de ${}^4\text{He}$, los cuales son $A_0 = 2.6$ MeV, $A_1 = 1.2$ MeV, $B_0 = -4.4$ MeV, y $B_1 = 1.2$ MeV. Los resultados para esta aproximación no guardan parecido con el experimento más allá de la ordenación, pero la similitud en la agrupación de los niveles es comparable a la de la interacción cki.

En la Figura 3, tenemos una conclusión parecida, los niveles están en mayor o menor desacuerdo cualitativo de la distribución de los niveles pero no cuantitativamente, además, algunos niveles $+1$, $+2$ están intercambiados.

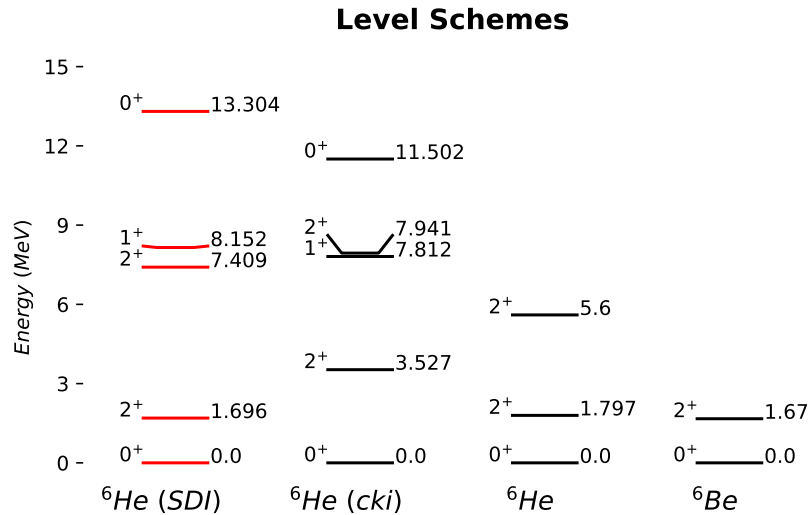


Figura 2: Capa P
Comparación de los cálculos ${}^6\text{He}/{}^6\text{Be}$ y datos experimentales para núcleos de con dos protones o neutrones, la interacción SDI se ajusto con $A_0 = A_1 = 1$ MeV.

Los niveles en rojo aparecen en la referencia [6] y se han conseguido reproducir.

El segundo nivel excitado del ${}^6\text{He}$ no está bien determinado y puede ser 2^+ o 0^+ .

9.1.2. Espectros en la capa SD.

En este caso se ha usado energías de partícula independiente que se indicaban: $\epsilon(0d_{5/2}) = 0$ MeV, $\epsilon(1s_{1/2}) = 0.87$ MeV y $\epsilon(0d_{3/2}) = 5.08$ MeV. Las constantes para la interacción SDI son $A_0 = 0.9$ y $A_1 = 0.5$ MeV.

La comparación de mis resultados con los espectros para los núcleos par-par en huecos ($A = 38$, ver Figura 7) que aparecen en [6] no ha dado los mismos valores para las constantes indicadas por una pequeña desviación, pero

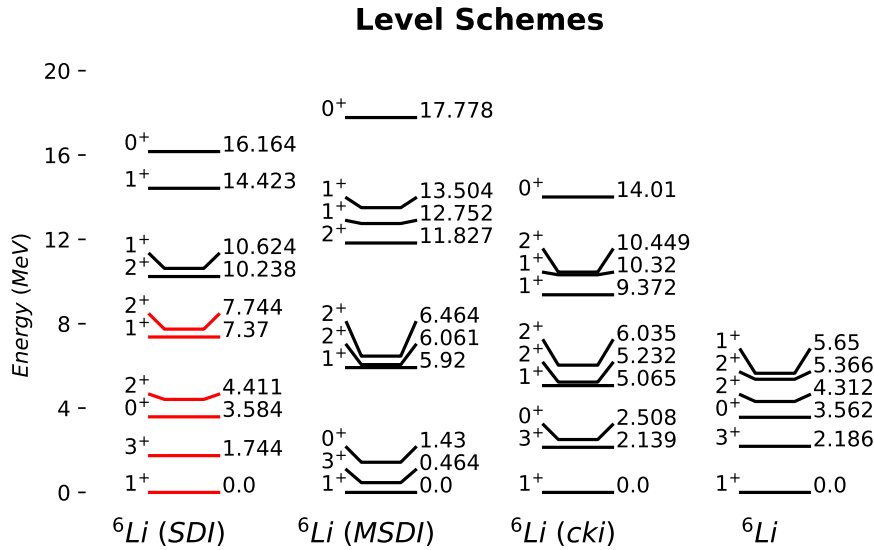


Figura 3: Capa P
Comparación de los cálculos y datos experimentales para el núcleo ${}^6\text{Li}$, el cual posee un protón y un neutrón, la interacción SDI se reajusto con $A_0=2.4$ MeV y $A_1=0.5$ MeV. Los niveles en rojo aparecen en la referencia [6] y se han conseguido reproducir.

Se ha incluido el espectro deducido de la interacción MSDI, con otra parametrización.

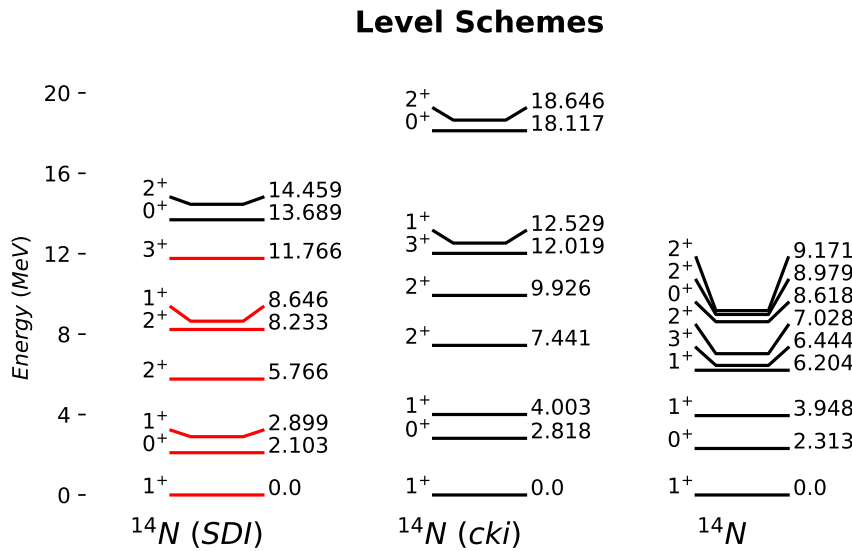


Figura 4: Capa P
Comparación de resultados y datos experimentales del ${}^{14}\text{N}$, un núcleo con dos huecos en los estados de protón y neutrón para la capa P. Interacción SDI con los parámetros $A_0 = 2.4$ MeV y $A_1 = 0.5$ MeV.

Los niveles en rojo aparecen en la referencia [6] y se han conseguido reproducir.

sí el mismo orden de niveles que aparece en el manual.

Con la interacción SDI, este caso, los resultados para los núcleos par-par e impar -impar para el Flúor son aceptables para el intervalo por debajo de 3-4 MeV (Figuras 5 y 6), no obstante, los niveles superiores presentan importantes diferencias. La interacción usd, por otra parte, devuelve unos niveles muy similares a los experimentales.

Por último, se estudian los estados de hueco en la capa SD. En este caso se ha usado energías de partícula independiente que se indicaban: $\epsilon(0d_{5/2}) = 0$ MeV, $\epsilon(1s_{1/2}) = 1.5$ MeV y $\epsilon(0d_{3/2}) = 4$ MeV. Adjunto solo el núcleo impar-impar (Figura 7), el resultado presenta bastantes similitudes en cuanto a la energía y la ordenación de los niveles, especialmente en el caso de la interacción usd. El cálculo del espectro de ${}^{38}\text{Ar}$ / ${}^{38}\text{Ca}$ no está presentado, pero presenta grandes diferencias entre los niveles, a excepción de la energía del primer estado excitado 2^+ . Los casos experimentales de estos núcleos requieren considerar excitaciones partícula-hueco entre el espacio SD y la capa $0f_{7/2}$.

Como se puede ver en estos ejemplos, la interacción esquemática SDI y las interacciones cki y usd (ajustadas a un espacio de valencia) han aportado espectros diferentes para los mismos niveles pero normalmente mantienen el ordenamiento de los mismos, permitiendo, con mayor o menor acuerdo, establecer una comparación con la información experimental.

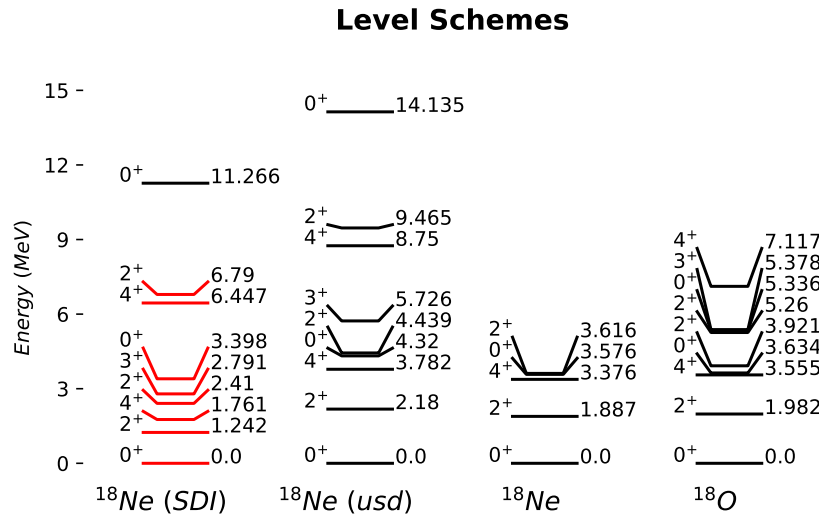


Figura 5: Capa SD
Cálculo del núcleo con dos partículas idénticas fuera del *core*. Las constantes para la interacción SDI son $A_0 = 0.9$ y $A_1 = 0.5$ MeV.

Los niveles en rojo aparecen en la referencia [6] y se han conseguido reproducir.

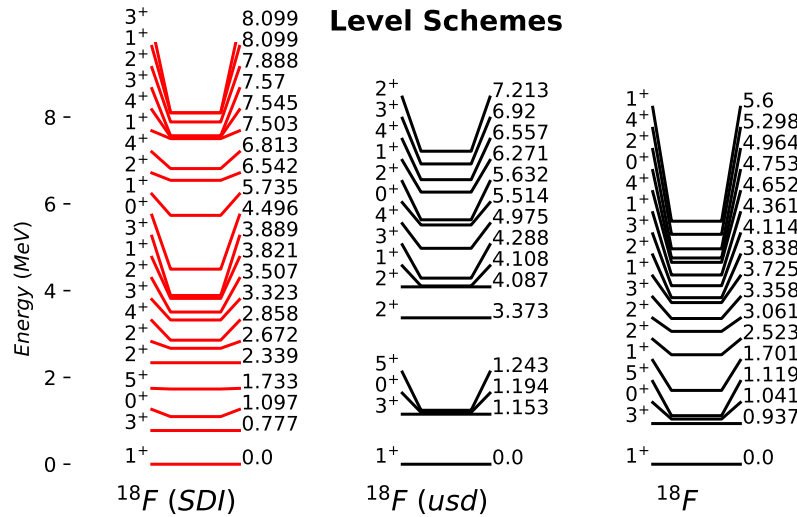


Figura 6: Capa SD
Comparación de cálculos y datos experimentales para el núcleo ^{18}K (impar-impar). Las constantes para la interacción SDI son $A_0 = 0.9$ y $A_1 = 0.5$ MeV.

Los resultados SDI se indican en morado por diferir ligeramente de los resultados de la referencia [6]

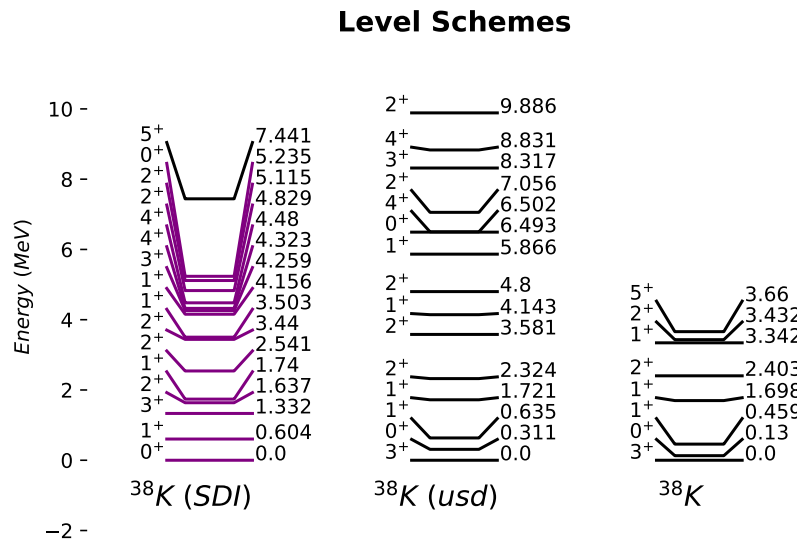


Figura 7: Capa SD
Comparación de cálculos y datos experimentales para estado hueco en el núcleo impar-impar ^{48}K . Las constantes para la interacción SDI son $A_0 = A_1 = 0.9$ MeV. El principal desacuerdo con los datos experimentales se da con la interacción SDI, donde la ordenación y espaciado de los niveles 3^+ , 1^+ y 0^+ no es el correcto.

Los resultados SDI se indican en morado por diferir ligeramente de los resultados de la referencia [6].

9.1.3. Reproducción del efecto del apareamiento, niveles del ^{210}Pb

La interacción de apareamiento es un fenómeno que ocurre cuando las partículas idénticas de una misma capa j encuentran un estado de mínima energía cuando acoplan sus momentos angulares un estado 0^+ , los demás estados (2^+ , 4^+ , \dots , $(2j-1)^+$) corresponden a estados excitados ¹². El apareamiento está ampliamente demostrado por los experimentos y en él se basa la teoría BCS que antes mencionamos.

Estos son los elementos de matriz a dos cuerpos de la SDI para la capa $1g_{9/2}$ (justo sobre el cierre de capa con $N=126$), donde debido a que se trata de dos partículas en una misma órbita, solo los $J + T$ impares tienen elementos no nulos. Para probar el comportamiento de dos partículas idénticas solo se emplearán los elementos $T=1$.

J	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$T=1$	-1.25	0.0	-0.3030	0.0	-0.1573	0.0	-0.0932	0.0	-0.0504	0.0

Podemos comprobar que la magnitud de los $\bar{v}_{abcd}(J, T = 1)$ disminuye con el aumento de J . De la misma forma, al evaluar las soluciones del sistema de dos protones o neutrones con *Antoine*, obtenemos el ordenamiento esperado en los niveles. Se adjuntan los niveles experimentales más bajos del ^{210}Pb para contrastar la validez de la teoría, a pesar de estar comparándola con los resultados de una interacción esquemática simple.

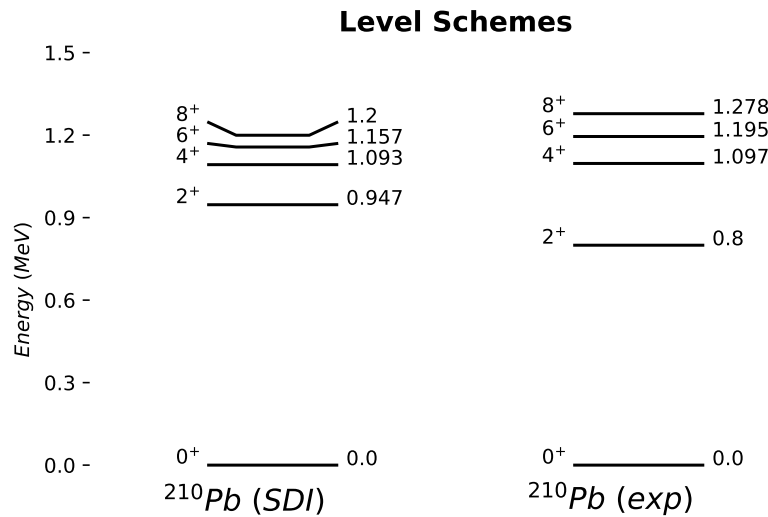


Figura 8: Espectro obtenido por *Antoine* para el núcleo ^{210}Pb , con las constantes de interacción SDI ajustadas para el espectro de dicho núcleo ($A_0=A_1=0.25$ MeV.)

9.2. Evolución de la energía del nivel fundamental a lo largo del llenado de la capa SD y PF.

Los sistemas con un core inerte no pueden ser empleados para dar una energía de ligadura experimental precisa, no obstante, sí permiten reproducir el comportamiento energético de un núcleo al que se le añaden nucleones. La ocupación de los niveles trae consigo una modificación de la energía y de la forma del estado fundamental, y es lo que se mostrará en esta sección.

Por medio del programa *Antoine* y *Taurus* comparo las diferentes interacciones. Como veremos, en todos los casos, la aproximación de campo medio está por encima de la obtenida por diagonalización, debido a la condición variacional del primero.

He realizado estos cálculos para todos los núcleos par-par que poseen isótopos en las diferentes capas de oscilador P ($0p_{3/2}$, $0p_{1/2}$), SD ($0d_{5/2}$, $0d_{3/2}$, $1s_{1/2}$) y PF ($0f_{7/2}$, $0f_{5/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$), tanto para varias cadenas de isótopos como de isóbaros. Solo obtendremos los niveles fundamentales debido a que es la única energía que puede aportar el método HFB (sin ir a métodos más allá del campo medio) y no aplicamos blocking, por lo que solo se calculan núcleos par-par.

¹² La cantidad de pares no acoplados al estado 0 se denomina **seniority**, que es un número cuántico introducido en el modelo esquemático de cuasi-espín para explicar el apareamiento. En este modelo, se deduce que el estado $s=0$ (o el $s=1$ si hay un número impar de partículas) tiene la energía mínima y los estados $s > 0$ son excitados, aumentando su energía y degeneración con s .

Como comentario, a las energías experimentales con las que se van a comparar los cálculos teóricos se les debe añadir la energía de ligadura del *core* inerte, no obstante, esta operación solo acerca nuestros resultados en el orden de magnitud, por lo que concedemos al desplazamiento una cierta arbitrariedad. El valor lo he ajustado de forma que el resultado de la interacción empírica coincida con el dato experimental en el núcleo sin neutrones.

9.2.1. Cadena de isótopos del Magnesio, capa SD

El llenado se puede observar con diferentes núcleos; el Neón, el Magnesio y el Silicio son buenos candidatos ya que tienen isótopos a lo largo de toda la capa. En mi caso, presento el magnesio, con $Z = 8 + z = 12$, posee un core inerte de 8 protones y cuatro protones en la capa SD. Los cálculos se realizan entre dos núcleos semimágicos en neutrones, del $^{20}_8\text{Mg}$ hasta el $^{32}_{20}\text{Mg}$. Como se puede observar, la interacción SDI y la *usd* poseen

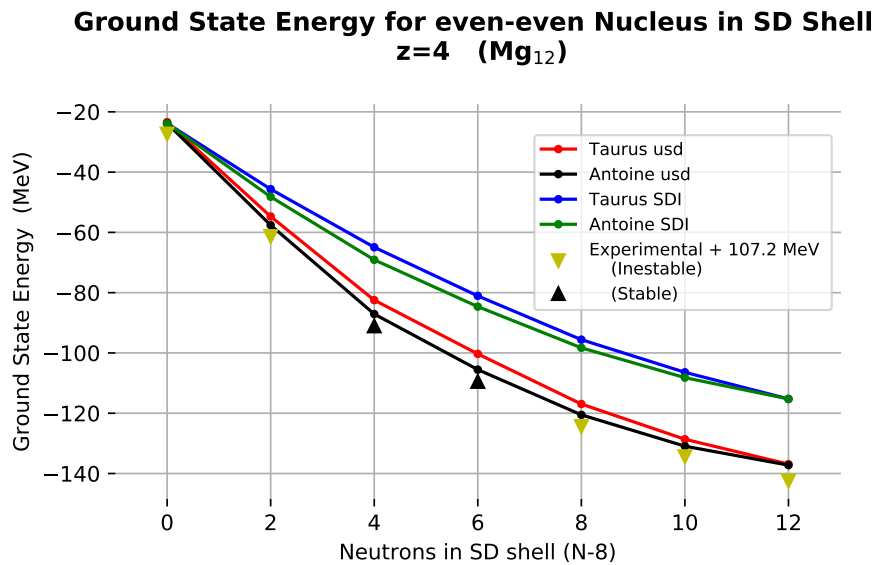


Figura 9:
Comparación de métodos e interacciones a lo largo de la capa. Las constantes para la interacción SDI son $A_0 = 0.9$ y $A_1 = 0.5$ MeV.

un comportamiento similar, en el que aumenta la energía de ligadura a medida que se llena la capa. Sin embargo, la interacción SDI no reproduce los resultados experimentales.

Notesé que las soluciones exactas y de campo medio difieren sistemáticamente entorno a la mitad de la capa. El motivo es que el espacio de configuración para el método HFB, para el estado fundamental 0^+ tiene una degeneración muy baja cerca del comienzo y del cierre de capa, lo cual facilita la obtención de una solución variacional muy cercana a la exacta y contrasta con el espacio altamente degenerado que encontramos a mitad de las capa.

9.2.2. Cadenas de isótopos en la capa PF

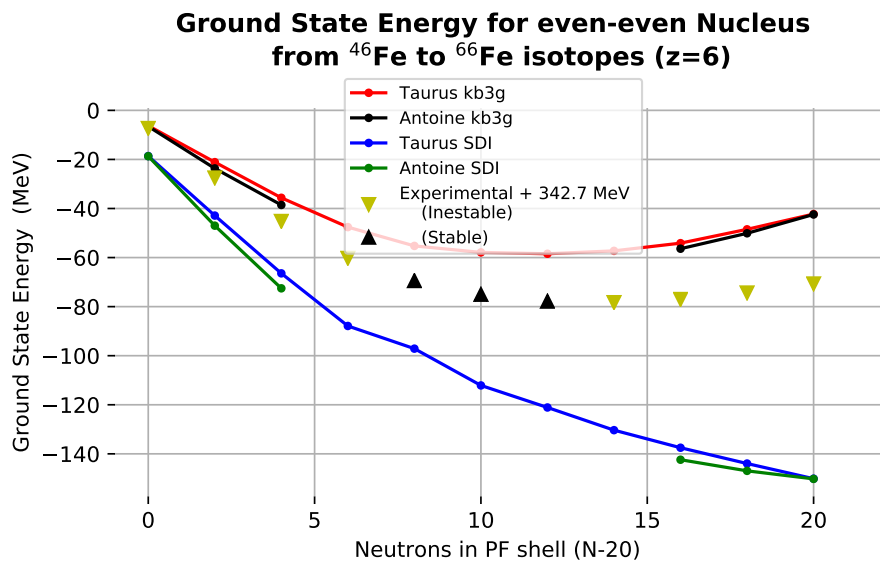
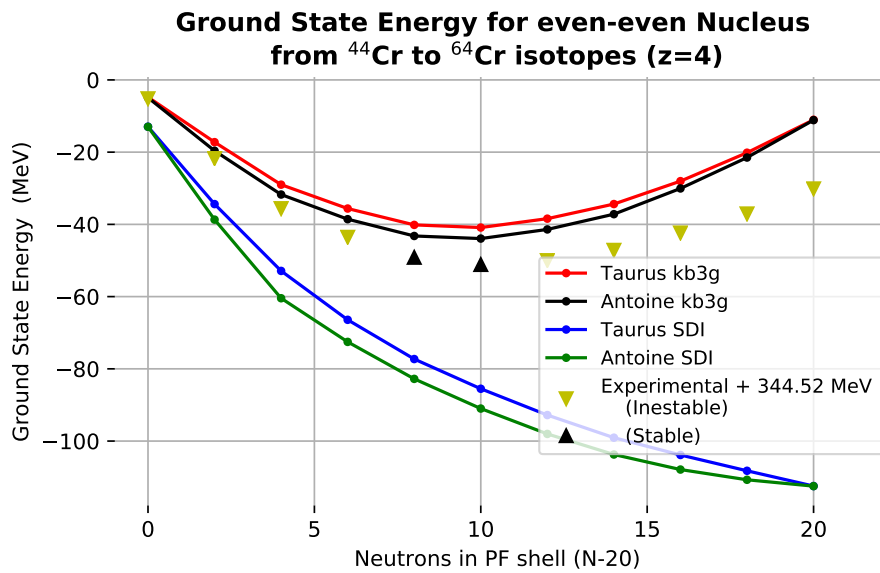
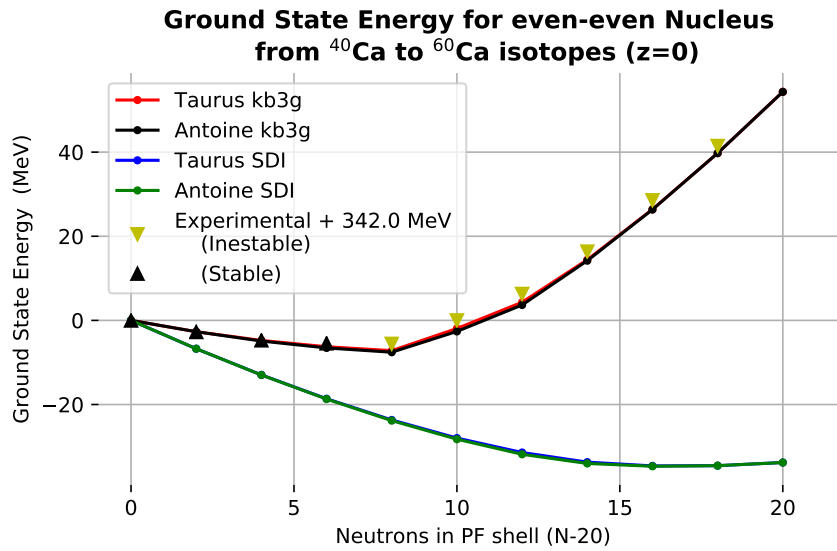
En este caso, la capa tiene muchos más estados, los cálculos tienen en cuenta los niveles $0f_{7/2}$ $0f_{5/2}$ $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$, es decir, once casos. La interacción SDI se fijó con las constantes $A_0=A_1=1$ MeV.¹³ Se calculan las cadenas isotópicas del Calcio, el Cromo, el Hierro (todas en la siguiente página) y la del Titanio (en el siguiente apartado).

En este caso, las interacciones presentan comportamientos diferentes, los primeros cuatro isótopos supondrán el llenado del nivel $0f_{7/2}$ y en este intervalo, ambas interacciones tienen una tendencia de aumento de la energía de ligadura con el llenado. Este comportamiento cambia rápidamente cuando se empieza a acceder a los niveles superiores, en los cuales los núcleos pierden energía de ligadura al aumentar la ocupación, donde el ejemplo del Calcio muestra explícitamente dicho comportamiento.

El motivo de este cambio de tendencia es la contribución de la energía de asimetría, una cantidad dependiente del isospín y que reproduce la parábola de masas observada en las energías de ligadura experimentales.

¹³Las energías de los niveles monoparticulares (en MeV) empleadas en todos estos cálculos son:

$E(f_{7/2})$	$E(1p_{3/2})$	$E(0f_{5/2})$	$E(1p_{1/2})$
0	2	6.5	4



El caso del Hierro esta introducido para hacer notar las limitaciones de los métodos cuando trabajamos en espacios de valencia de elevada degeneración y evaluamos núcleos que ocupan la mitad de la capa. En primer lugar, *Antoine* solo puede evaluar los tres primeros estados (y los correspondientes isótopos con huecos en los estados de neutrón) debido a limitaciones de la memoria requerida.

Se observa de nuevo que las soluciones de campo medio difieren de las exactas cuando la ocupación maximiza la degeneración del espacio de configuración, lo cual ocurre a mitad de capa.

Por último, aparece un desacuerdo entre la energía experimental y de los elementos kb3g.a42 a medida que aumentamos el número de neutrones y de protones. Esto es debido a que el espacio de valencia incluye solo las capas $0f - 1p$, y no es lo suficientemente grande para describir los estados experimentales. Para ello se debería incluir la capa $0g - 1d$ o al menos el estado monoparticular $0g_{9/2}$, el cual comienza a poblarse cuando la ocupación aumenta.

9.2.3. Corrección de la sobreestimación de la energía de ligaura por la interacción SDI en la capa PF. Aplicación de la interacción MSDI

Como hemos podido comprobar en el apartado anterior, la solución SDI muestra una gran diferencia con respecto a los resultados experimentales, como indicamos en el apartado 5.1, esto se debe a una desviación la energía para los estados $T=0$ y $T=1$, que puede corregirse con la adición de un término *ad hoc* a la interacción SDI, interacción conocida como MSDI.

En este caso, evaluaré la energía de los isótopos del Titanio pero incluyendo las energías debidas a los elementos de matriz (74). Las energías de partícula independiente del cálculo anterior y empleo unos parámetros A_0 , B_0 , A_1 y B_1 extraídos de la referencia [24]. Como se puede comprobar el ajuste soluciona la diferencia.

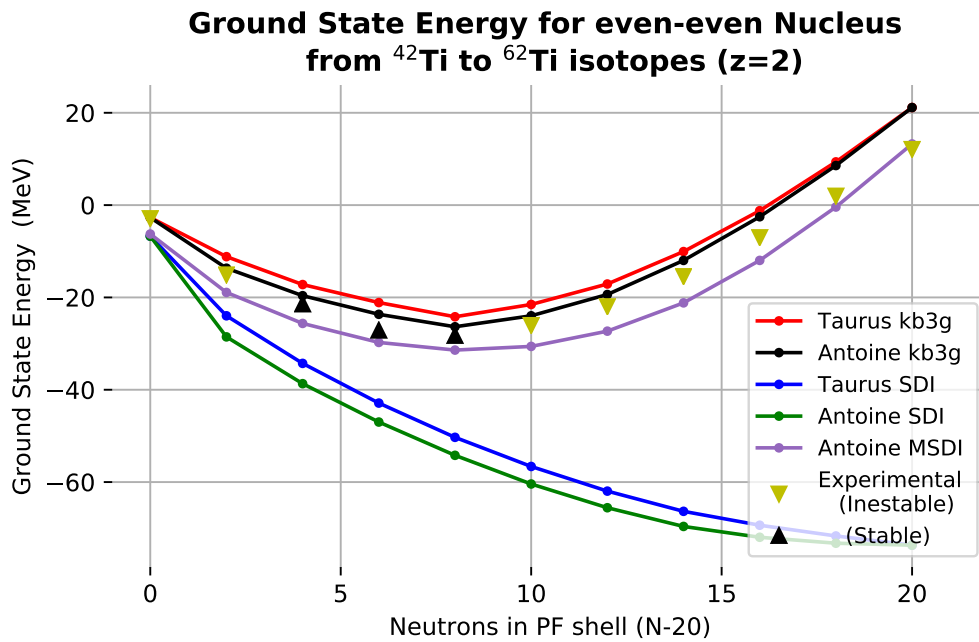


Figura 10: Comparación de interacciones y métodos. Energía experimental desplazada +344 MeV. Parámetros MSDI empleados: $A_0 = 0.6$ MeV $A_1 = 1$ MeV $B_0 = -1.13$ MeV $B_1 = 0.47$ MeV

10. Resumen y Conclusiones

En este trabajo he realizado el cálculo de elementos de matriz a dos cuerpos de interacciones nucleares. Para poder evaluarlos, he introducido la descomposición multipolar y el método de las integrales Talmi; con el primero he podido calcular los elementos de matriz de la fuerza de rango cero SDI (y MSDI); y con el segundo se puede resolver de una forma eficiente potenciales dependientes de la distancia relativa entre nucleones, ya sean interacciones centrales o no (entre las últimas se encuentra el potencial tensor y la interacción espín-órbita).

La implementación del cálculo de estos elementos de matriz a dos cuerpos ha sido realizada en con un código nuevo en C++.

Estos elementos de matriz se usan para calcular estados fundamentales y excitados de núcleos ligeros usando dos métodos de resolución del problema de muchos cuerpo: el método variacional autoconsistente de Hartree-Fock-Bogolyubov con restauración de las simetrías, y la resolución directa por medio de la diagonalización del Hamiltoniano de interacción y la mezcla de configuraciones.

Ambos métodos tienen ventajas y desventajas, se emplean los códigos *Antoine* y *Taurus* y se comparan en la última sección, usándose para aplicar las interacciones deducidas en la primera parte del trabajo para obtener la energía fundamental y el espectro de diferentes núcleos de forma satisfactoria.

Como perspectivas de futuro está la aplicación de este código al cálculo de elementos de matriz para evaluar interacciones más realistas, en particular, interacciones *ab-initio* que se puedan desarrollar como suma de varias gaussianas. Estos elementos de matriz se introducirán en los programas *Taurus* y/o *Antoine* para resolver problemas de estructura nuclear.

Parte III

Anexo y Referencias

A. Relaciones de recurrencia de los paréntesis de Brody-Moshinsky y elemento $n_1=n_2=0$

Los brackets de Brody-Moshinsky no tienen una expresión general pero sí están relacionados entre ellos. Empleando las propiedades de recurrencia de los polinomios asociados de Laguerre (los cuales conforman las funciones de onda en ambas bases) tenemos

$$(n+1)L_{n+1}^{l+1/2}(r^2) = ((2n+l+3/2)-r^2)L_n^{l+1/2}(r^2) - (2n+l+3/2)L_{n-1}^{l+1/2}(r^2) \quad (109)$$

Utilizamos esta relación con la función de onda radial (8) para el ket $|(n+1)l_1, n_2l_2; \lambda\mu\rangle$, después, la multiplicamos por $\langle nl, NL; \lambda\mu|$. Dado que la relación de conservación de energía (36) se debe respetar, solo quedará el bracket de interés y el elemento de matriz dependiente de $-r_1^2$.

$$\langle nl, NL, \lambda | (n_1+1)l_1, (n_2)l_2, \lambda \rangle = \frac{1}{\sqrt{(n_1+1)(n_1+l_1+3/2)}} \times \sum_{n'l'N'L'} \langle nl, NL, \lambda | -r_1^2 | n'l', N'L', \lambda \rangle \langle n'l' N'L', \lambda | n_1l_1 n_2l_2, \lambda \rangle \quad (110)$$

Como se puede ver, se vuelve a aplicar la transformación para poder evaluar el elemento de matriz en la nueva base. Usando las relaciones (33), cambiamos la coordenada $r_1^2 = (r^2 + R^2 + 2\vec{R} \cdot \vec{r})/2$. Solamente seis de los posibles $n'l'N'L'$ elementos son no nulos:

n'	l'	N'	L'	$\langle nl, NL, \lambda -r_1^2 n'l', N'L', \lambda \rangle$
$n-1$	l	N	L	$\frac{1}{2}\sqrt{n(n+l+1/2)}$
n	l	$N-1$	L	$\frac{1}{2}\sqrt{N(N+L+1/2)}$
$n-1$	$l+1$	$N-1$	$L+1$	$(-)^{\lambda+L+l}\sqrt{nN(l+1)(L+1)} W(l(l+1), L(L+1); 1\lambda)$
$n-1$	$l+1$	N	$L-1$	$(-)^{\lambda+L+l}\sqrt{nL(N+L+1/2)(l+1)} W(l(l+1), L(L-1); 1\lambda)$
n	$l-1$	$N-1$	$L+1$	$(-)^{\lambda+L+l}\sqrt{Nl(n+l+1/2)(L+1)} W(l(l-1), L(L+1); 1\lambda)$
n	$l-1$	N	$L-1$	$(-)^{\lambda+L+l}\sqrt{Ll(n+l+1/2)(N+L+1/2)} W(l(l-1), L(L-1); 1\lambda)$

Tras algunas iteraciones, alcanzamos el caso $n_1 = n_2 = 0$. El elemento $\langle nl, NL, \lambda | 0l_1, 0l_2, \lambda \rangle$ puede evaluarse analíticamente; en la referencia [1], se soluciona empleando como argumento la fórmula de traslación de un campo multipolar. Este es el valor que se presenta en el artículo:

$$\langle nl, NL, \lambda | 0l_1, 0l_2, \lambda \rangle = \frac{l_1!l_2!}{(2l_1)!(2l_2)!} \frac{(2l+1)(2L+1)}{2^{l+L}} \frac{(n+L)!(N+L)!}{n!(2n+2l+1)!N!(2N+2L+1)!} \times (-)^{n+l+L-\lambda} \sum_x (2x+1)W(lL, l_1l_2; \lambda x)A(l_1l, l_2L, x) \quad (111)$$

donde $W(lL, l_1l_2; \lambda x)$ es el símbolo de Racah y x está restringido al acoplo del momento angular ($|l-l_1| \leq x \leq l+l_1$ y $|L-l_2| \leq x \leq L+l_2$). El coeficiente $A(l_1l, l_2L, x)$ viene dado por

$$A(l_1l, l_2L, x) = \left(\frac{(l_1+l+x+1)!(l_1+l-x)!(l_1+x-l)!}{(l+x-l_1)!} \right)^{1/2} \left(\frac{(l_2+L+x+1)!(l_2+L-x)!(l_2+x-L)!}{(L+x-l_2)!} \right)^{1/2} \times \sum_q \frac{(-)^{(l+q-l_1)/2}}{(q-x)!(q+x+1)!} \frac{(l+q-l_1)!}{(\frac{1}{2}(l+q-l_1))!(\frac{1}{2}(l-q+l_1))!} \frac{(L+q-l_2)!}{(\frac{1}{2}(L+q-l_2))!(\frac{1}{2}(L-q+l_2))!} \quad (112)$$

donde q está restringido a valores no negativos para los que $l+q-l_1$ es par y los argumentos de los factoriales son positivos.

B. Obtención del elemento de matriz reducido $\langle n, l || V(r) || n', l' \rangle$ por medio de las Integrales de Talmi

Con los brackets de transformación dados en (35) se pueden evaluar los elementos de matriz de una interacción de tipo central, Espín-Órbita y Tensorial [1], los cuales se pueden expresar en términos de los elementos de matriz reducidos $\langle nl || V(r) || n'l' \rangle$. Estos elementos se obtienen en términos de las **integrales de Talmi** I_p .

$$\langle nl || V(r) || n'l' \rangle = \int_0^\infty r^2 dr \mathcal{R}_{nl}(r) V(r) \mathcal{R}_{n'l'}(r) = \sum_p B(nl, n'l', p) I_p \quad (113)$$

Las cuales están definidas como

$$I_p = \frac{2}{\Gamma(p+3/2)} \int_0^\infty \left(\frac{r}{b}\right)^{2p} \exp\left(-\frac{r^2}{b^2}\right) V(r) r^2 dr \quad (114)$$

Estas funciones se deducen integrando la función (8), donde conviene expresar el coeficiente α_{nlk} de (9) en función de factoriales o dobles factoriales $x!!$ ($x \in \mathbb{N}$).

$$\alpha_{nlk} = \sqrt{\frac{(2(n+l)+1)!! 2^{l+2-n}}{b^3 \sqrt{\pi} n!}} \left\{ \binom{n}{k} \frac{(-1)^k 2^k}{(2(k+l)+1)!!} \right\} \quad (115)$$

La función de onda puede expresarse empleando la función ventana $\theta(a, x, b)$ con el fin de obtener los límites de las series:

$$\theta(a, x, b) = \begin{cases} 1 & \text{si } a \leq x \leq b \\ 0 & \text{si } a \geq x \text{ o bien } x \geq b \end{cases}$$

$$\langle nl || V(r) || n'l' \rangle = \sum_{k, k'=-\infty}^{+\infty} \alpha_{nlk} \alpha_{n'l'k'} \theta(0, k, n) \theta(0, k', n') \int_0^\infty \left(\frac{r}{b}\right)^{\overbrace{l+l'+2k+2k'}^{2p}} \exp\left(-\frac{r^2}{b^2}\right) V(r) r^2 dr$$

Con el cambio de variable $k' = p - \frac{l+l'}{2} - k$, podemos expresar el elemento de matriz en serie de integrales de Talmi. El límite del índice p se comprueba directamente con $\theta(0, k, n)$:

$$\begin{aligned} \theta(0, k', n') &\rightarrow k \leq p - \frac{l+l'}{2} \leq n' + k \\ (\text{mín}(k) = 0) &\leq p - \frac{l+l'}{2} \leq n' + (\text{máx}(k) = n) \end{aligned}$$

Y así

$$\langle nl || V(r) || n'l' \rangle = \sum_{p=\frac{1}{2}(l+l')}^{\frac{1}{2}(l+l')+n+n'} \underbrace{\left\{ \frac{\Gamma(p+3/2)}{2} \sum_{k=k_0}^{k_f} \alpha_{nlk} \alpha_{n'l'(p-\frac{1}{2}(l+l')-k)} \right\}}_{B(nl, n'l', p)} I_p \quad (116)$$

Despejando α_{nlk} (115) (de forma que todo se exprese en factoriales), se obtiene el coeficiente $B(nl, n', l', p)$:

$$\begin{aligned} B(nl, n', l', p) &= \frac{(2(p+1))! (-)^{p-\frac{l+l'}{2}}}{b^3 (p+1)! 2^{n+n'}} \sqrt{\frac{n! n'! (2(n+l+1))! (2(n'+l'+1))!}{(n+l+1)! (n'+l'+1)!}} \times \\ &\times \sum_{k=k_0}^{k_f} \frac{(l+k+1)! (p-\frac{l-l'}{2}-k+1)!}{k! (n-k)! (2(l+k+1))! (p-\frac{l+l'}{2}-k)! (n'-p+\frac{l+l'}{2}+k)! (2(p-k+1)+l'-l)!} \end{aligned} \quad (117)$$

Los índices k_0 y k_f son los márgenes entre los que los factoriales de la fórmula anterior serán no negativos:

$$k_0 = \text{máx} \left\{ 0, p - \frac{1}{2}(l+l') - n' \right\} \quad \& \quad k_f = \text{máx} \left\{ n, p - \frac{1}{2}(l+l') \right\}$$

La evaluación de las integrales de Talmi depende del potencial de interacción $V(r)$ escogido. Presento aquí algunos ejemplos que pueden ser útiles (μ tiene unidades de longitud y κ unidades de longitud dividida por carga):

1. **Potencial Gaussiano:** $V(r) = \exp(-(r/\mu)^2)$

$$I_p = \frac{b^3}{(1 + (b/\mu)^2)^{p+3/2}} \quad (118)$$

2. **Potencial Coulombiano:** $V(r) = \frac{\kappa e}{r}$

$$I_p = \frac{\kappa e b^2 p!}{\Gamma(p + 3/2)} \quad (119)$$

3. **Potencial de tipo Yukawa:** $V(r) = \frac{\exp(-r/\mu)}{(r/\mu)}$

$$I_p = \frac{\mu b^2 \exp(b/2\mu)^2}{\Gamma(p + 3/2)} \sum_{i=0}^{2p+1} \binom{2p+1}{i} \Gamma\left(\frac{i+1}{2}\right) \left((-1)\frac{b}{2\mu}\right)^{2p+1-i} \quad (120)$$

Referencias

- [1] M. Moshinsky, Transformation Brackets for Harmonic Oscillator Functions. Nucl. Phys. 13, 19-40 (1959)
- [2] M. Moshinsky, Short Range Forces and Nuclear Shell Theory. Nucl. Phys. 8, 104-116 (1958)
- [3] I. Talmi Nuclear Spectroscopy with Harmonic Oscillator Wave-Functions. Helvetica physica acta, vol.25, no.3, pp.185-234.
- [4] I. Talmi Simple Models of Complex Nuclei Capítulos 3, 4 y del 7 al 13.
- [5] D.M. Brink E. Boeker, Effective Interactions for Hartree-Fock Calculations. Nucl. Phys. A 91, 1-26 (1967)
- [6] J.Suhonen From Nucleons to Nucleus Cap. 8 (Nuclear Two-Body Interaction and Configuration Mixing).
- [7] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, Ulf-G. Meißner Modern theory of nuclear forces Rev. Mod. Phys. 81, 1773 (2009)
- [8] S.K.Bogner, R.J.Furnstahl, A.Schwenk From low-momentum interactions to nuclear structure Progress in Particle and Nuclear Physics Volume 65, Issue 1, Pages 94-147 (2010)
- [9] S.Cohen, D.Kurath, Effective interactions for the 1p shell. Nucl. Phys. 73 1-24 (1965);
- [10] B.A.Brown, B.H.Wildenthal, Status of the Nuclear Shell Model; Ann. Rev. Nucl. Part. Sci. 1988. 38: 29-66;
- [11] A. Poves, J. Sánchez-Solano, E. Caurier, F. Nowacki, Shell model study of the isobaric chains A = 50, A = 51 and A = 52. Nucl. Phys. A 694 (2001) 157-198;
- [12] M. Honma, T. Otsuka, B.A. Brown, and T. Mizusaki, Shell-model description of neutron-rich pf-shell nuclei with a new effective interaction GXPF 1. Eur. Phys. J. A 25, s01, 499-502 (2005);
- [13] T.T.S.Kuo, G.E.Brown, Reaction matrix elements for the 0f-1p shell nuclei. Nucl. Phys. A 114, 235(1968)
- [14] P.Ring P.Schuck The Nuclear Many-Body Problem Cap 4 (Nuclear Forces).

- [15] P.Ring P.Schuck The Nuclear Many-Body Problem Cap 7 (The Generalized Single-Particle Model (HFB Theory)).
- [16] P.Ring P.Schuck The Nuclear Many-Body Problem Cap 11 (Restoration of Broken Symmetries).
- [17] D.J. Rowe Nuclear Collective Motion. Models and Theory.
- [18] W. Greiner W.A.Maruhn Nuclear Models. Cap 7.2 (The Hartree-Fock Aproximation).
- [19] J.L.Egido, J.Lessing, V.Martin, L.M.Robledo On the solution of the Hatree-Fock-Bogoliubov equations by conjugate gradient method. Nucl. Phys. A. 594(1) 70-86 (1995)
- [20] M.Bender, P.H.Heenen, P.G Reinhard Self-consistent mean-field models of nuclear structure. Rev.Mod.Phys. 75, 121 (2003)
- [21] L.M. Robledo, T.R. Rodríguez , R. R. Rodríguez-Guzmán Mean field and beyond description of nuclear structure with the Gogny force: A review arXiv:1807.02518v1 (2018)
- [22] V.N.Fomenko J. Phys. (G.b) A3, 8 (1970)
- [23] B.Bally T.R. Rodríguez A.Sánchez Taurus pnvap code. (to be published)
- [24] P.J. Brussaard and P.W.M. Glaudemans Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy. Cap. 6 (Effective Interactions).
- [25] P.J. Brussaard and P.W.M. Glaudemans Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy. Cap. 3 (Perturbation Theory and Configuration Mixing).
- [26] P.J. Brussaard and P.W.M. Glaudemans Shell Model Applications in Nuclear Spectroscopy. Cap. 18 (Miscellaneous Topics).
- [27] V.Devanathan Nuclear Physics Cap. 4 (The Nuclear Force) and Cap. 6 (Nuclear Shell Model)
- [28] V.Devanathan Angular Momentum Techniques in Quantum Mechanics.
- [29] E. CAURIER, shell model code ANTOINE, IRES, STRASBOURG 1989-2004
- [30] E. CAURIER, F. NOWACKI Acta Physica Polonica 30 (1999) 705
- [31] E. CAURIER, G. MARTINEZ-PINEDO, F. NOWACKI, A. POVES, A. P. ZUKER Reviews of Modern Physics 77, No 2, April 2005
- [32] K.L.G. Heyde The Nuclear Shell Model
- [33] J.F. Berger, M. Girod and D. Gogny, Nucl. Phys. A 428, 23 (1984)
- [34] International Atomic Energy Agency - Nuclear Data Section <https://www-nds.iaea.org/>