





IFT

Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.006/96

**Distribuições Nucleares com Correlação do Método
de Coordenadas Geradoras**

Carlos Alberto Tello Echevarria

Orientador

Diógenes Galetti



Fevereiro 1997

Índice

Introdução	1
0.1 Considerações gerais	1
0.1.1 Estados de muitos corpos	1
0.1.2 Correlações entre nucleons	3
0.1.3 Interações nucleon-nucleon	6
1 O método de coordenadas geradoras	11
2 Interação nucleon-nucleon	15
2.1 Interação de Skyrme	15
2.2 Interação de Gogny	16
3 Cálculo das densidades nucleares com o GCM : Aspectos gerais	18
3.0.1 Densidade espacial nuclear	19
3.0.2 Distribuição de momentos nuclear	20
4 Aplicação do GCM para o cálculo de distribuições nucleares em núcleos mágicos leves	23
4.1 Cálculo do núcleo do operador de superposição	24
4.2 Cálculo do núcleo do operador de energia	25
4.2.1 Caso de interação de Skyrme	26
4.2.2 Caso da Interação de Gogny	29

5	Cálculo numérico das distribuições nucleares usando o GCM	32
6	Resultados e Conclusões	35
6.1	Apêndice	38
6.1.1	Elementos da matriz de superposição	38
6.1.2	Parâmetros das interações de Skyrme	39
6.1.3	Parâmetros da interação de Gogny	39
6.1.4	Coefficientes do núcleo de energia com a interação de Skyrme . .	39
6.1.5	Figuras	40
6.1.6	Programas	49

Agradecimentos

À minha mãe Rosalia e meus irmãos Luis, Beatriz, Vilma e Bertha, por seu amor e seu apoio em minhas escolhas.

Ao professor Diogenes Galetti, pela sua orientação e diálogo franco dentro e fora dos assuntos acadêmicos.

Aos amigos Orlando, Harold, pela acolhida que me deram quando de minha chegada à São Paulo.

As minhas amigas, Sylvia e Angelica, cuja amizade é tão grande quanto a distância que hoje nos separa.

Ao CNPq, pelo apoio financeiro que tornou este trabalho possível.

À memória de meu pai.

Summary

“ The human understanding is of its own nature
prone to suppose the existence of more order
and regularity in the world than it finds.
And though there be so many things in nature
which are singular and unmatched,
yet it devises for them parallels and conjugates
and relatives which do not exist.”

Francis Bacon (1561-1626)

Resumo

Neste trabalho usamos o tratamento do Método de Coordenadas Geradoras (GCM), o qual incorpora correlações de nosso interesse para o estado fundamental de núcleos, no cálculo de distribuições espacial e de momentos de núcleos duplamente mágicos leves, a saber, ^4He , ^{16}O e ^{40}Ca . Primeiramente descrevemos brevemente o anatz do GCM e apontamos os bem conhecidos problemas de instabilidade da função peso, solução da equação de Griffin-Wheeler, os quais podem ser contornados. Desenvolvemos o método usando as interações efetivas fenomenológicas de Skyrme e de Gogny. Finalmente os resultados são comparados com dados experimentais do fator de forma de espalhamento elástico e-núcleo no caso do ^4He . Observa-se uma melhor descrição dos resultados nos altos momentos transferidos, quando comparamos com o método variacional.

Palavras Chave: correlações nucleares, interação efetiva fenomenológica, GCM, núcleo de superposição, função geradora.

Área de conhecimento: 1.05.04.00-1

Abstract

In this work we use the Generator Coordinate Method (GCM) to calculate nuclear momentum distributions, taking into account suitable correlations in the ground states of nuclei. Firstly we describe the ansatz of the method and the well-known instability problems of the weight function, which is the solution of the Griffin-Wheeler equation, that can, in some cases, be circumvented. We develop the method using phenomenological effective interactions such as Skyrme and Gogny. Finally the results are compared with form factor experimental data of e-nucleus scattering for ${}^4\text{He}$. We observe a better description at high transferred momenta when compared to the variational method results.

Keywords: correlations, phenomenological effective interactions, GCM, kernel of energy, generator function.

Introdução

0.1 Considerações gerais

Antes de tratarmos de modo específico o tema da presente dissertação, devemos descrever de maneira muito breve certos aspectos básicos importantes de estrutura nuclear que nós usaremos no que segue.

0.1.1 Estados de muitos corpos

Nos cálculos microscópicos de muitos-corpos nuclear, um dos objetivos principais consiste em resolver o problema de valores próprios, usando os diferentes graus de liberdade associados com cada nucleon individual, por exemplo, coordenadas, spin e isospin. O hamiltoniano H do sistema de A nucleons é constituído de uma soma sobre as energias de cada nucleon, associada à parte de um corpo, e da soma das interações entre pares e/ou trios de nucleons etc. e os níveis de energia são dados pelos valores próprios E_i da equação de Schrödinger

$$H\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = E_i\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A).$$

Valores de quantidades físicas associadas a outras propriedades do sistema podem ser obtidos a partir dos valores esperados calculados com os vetores próprios $\Psi_i(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$ para os correspondentes operadores. A descrição microscópica do problema de muitos corpos nuclear se centra na solução dessa equação (usamos $\vec{r}_i$ para representar todas as variáveis independentes pertencentes ao nucleon i): este é um problema altamente

complexo de se resolver do ponto de vista numérico e muito mais analiticamente. Uma aproximação nos cálculos microscópicos de estrutura nuclear usualmente consiste em usar bases de funções de onda de muitos corpos construídas a partir de funções de onda de partícula independente $\phi_i(\vec{r}_j)$. Para assegurar a antissimetrização da função de onda dos férmions, um estado base de muitos corpos se escreve em forma de um determinante de Slater,

$$\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \det \begin{bmatrix} \phi_1(\vec{r}_1) & \phi_1(\vec{r}_2) & \dots & \phi_1(\vec{r}_A) \\ \phi_2(\vec{r}_1) & \phi_2(\vec{r}_2) & \dots & \phi_2(\vec{r}_A) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \phi_A(\vec{r}_1) & \phi_A(\vec{r}_2) & \dots & \phi_A(\vec{r}_A) \end{bmatrix}.$$

Em princípio, o espectro de partícula independente é infinito e com tal espaço de Hilbert de infinitas dimensões o problema de valores próprios é impraticável se não impossível de resolver. Usualmente se usa só uma parte pequena do espaço de Hilbert para se obter resultados práticos. Tomando-se diferentes conjuntos de A estados de partícula independente, dentre os infinitos possíveis, se obtém um diferente estado base de muitos corpos.

Existem vários modos de construir as funções de onda de partícula independente $\phi_i(\vec{r}_j)$, entre eles, um conveniente, consiste em considerar funções de onda de partícula independente provenientes da diagonalização de um hamiltoniano de um corpo $h(\vec{r}_i)$

$$h(\vec{r}_i)\phi_k(\vec{r}_i) = \epsilon_k\phi_k(\vec{r}_i);$$

aqui ϵ_k é a energia de partícula independente. O hamiltoniano $h(\vec{r}_i)$ é constituído de um certo potencial médio $v(\vec{r}_i)$, de um corpo, comum para todos os nucleons, que pode ser local e/ou não local, determinado de modo autoconsistente como no caso de Hartree-Fock. Fenomenologicamente são exemplos de potenciais locais usuais o oscilador harmônico e o potencial de Woods-Saxon. Dessa maneira o hamiltoniano de muitos corpos com interações até dois corpos se representa por.

$$H = \sum_{i=1}^A h(\vec{r}_i) + \sum_{i \neq j=1}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j),$$

onde $V(\vec{r}_i, \vec{r}_j)$ é a interação de dois corpos residual. Os elementos de matriz de H nesta base de muitos corpos podem ser expressados como uma soma de dois termos

$$H_{jk} = \delta_{jk} \sum_{n=1}^A \epsilon_n + V_{jk}.$$

O primeiro termo é diagonal na base de estados próprios de muitos corpos construídos a partir de produtos de funções de onda próprias de $h(\vec{r}_i)$ e o segundo termo, escrito como

$$V_{jk} = \langle \Phi_j(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) | \sum_{p \neq q=1}^A V(\vec{r}_p, \vec{r}_q) | \Phi_k(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \rangle,$$

é a contribuição do hamiltoniano correspondente a interação residual.

0.1.2 Correlações entre nucleons

Na base adotada acima, os únicos elementos de matriz da hamiltoniana de muitos corpos fora da diagonal provêm de V_{jk} , ou seja, da parte de dois corpos do hamiltoniano. Quando as contribuições provenientes da interação residual são suficientemente pequenas quando comparadas com as correspondentes à parte de um corpo do hamiltoniano, elas podem ser ignoradas e, nesta aproximação, os valores próprios são dados pela soma das energias de partícula independente somente. O problema de muitos corpos é reduzido a um problema de contribuições de um corpo muito mais simples. Esta é a idéia principal do modelo de partículas independentes, e uma boa aproximação para uma solução microscópica do problema de estrutura nuclear quando um hamiltoniano realístico de uma partícula é disponível (este é o objetivo, por exemplo, do método Hartree-Fock (HF)).

Na realidade, muitas propriedades nucleares observadas têm seu comportamento caracterizado a partir de correlações entre dois ou mais nucleons. Nesses casos, combinações lineares de produtos de estados de partícula independente são

necessárias para podermos decrivê-las. o modelo de partícula independente já não é aplicável (uma vez que ele não introduz correlações de mais que um corpo), e os efeitos das interações residuais devem ser levados em conta nos cálculos de estados de muitos corpos (entendemos por correlação aqui só certos vínculos ou restrições na forma que deve ter a função de onda do sistema de muitos-corpos).

Há casos frequentes em que a função de onda de muitos corpos é formada por uns poucos estados base de muitos corpos (determinantes de Slater, por exemplo), quando então ela é particularmente boa para a descrição dos estados de muitos corpos de energia mais baixas, próximos ao estado fundamental. Para estes casos se considera que o problema de muitos corpos pode ser aproximado diagonalizando a matriz hamiltoniana em um pequeno, mas bem escolhido subespaço daqueles estados. O modelo de camadas é baseado na aproximação mais baixa — um único estado base — e se aplica sobretudo para estados de baixas energias em núcleos perto de camadas fechadas.

Em contrapartida, no ^{16}O por exemplo, as excitações mais baixas, de acordo com a aproximação do oscilador harmônico do modelo de camadas, deveriam estar ao redor de $\hbar\omega_0 \sim 11.5$ MeV. Experimentalmente são observados outros estados perto de 6.14 MeV e uma ressonância em 22 MeV com largura de 5 MeV, chamada ressonância dipolar gigante. Um modelo de camadas puro envolvendo excitações simples não pode explicar a alta energia da ressonância gigante, mas isso pode ser explicado se nós supomos que há movimentos com participação coerente de muitos nucleons. As excitações coletivas se caracterizam por ter probabilidades de transição entre uma ou duas ordens de magnitude maior que as transições de uma partícula e, por outro lado, aparecem em espectros de diferentes núcleos em regiões inteiras da tabela periódica com regularidade e a energia de excitação varia lentamente com A . Ou seja, há estados cuja descrição microscópica é muito mais complicada e então, nesses casos, se usam modelos coletivos.

A incorporação do princípio de Pauli na construção de funções de onda de muitos corpos é considerada também como sendo uma correlação entre nucleons: ela implica em uma restrição na forma que pode ter uma função de onda de muitos corpos e que

consiste no princípio de antissimetrização total, levando em conta que os nucleons são férmions.

No caso geral de muitas partículas com fortes correlações, o tratamento de simetrias é um problema sério pelas seguintes razões:

- por um lado nós queremos descrever o sistema com funções de onda simples (produto de estados de partícula independente ou quasipartícula).
- por outro lado, não somos capazes de levar em conta importantes correlações entre nucleons com funções de onda simples se queremos, ao mesmo tempo, o comportamento adequado de simetria. Por exemplo, usando um produto de funções de onda planas certamente não será possível descrever as fortes correlações entre os nucleons que produzem sua aglomeração em núcleos finitos. Tais correlações podem ser descritas por um campo médio (por exemplo, modelo de camadas) e o produto de estados com funções de onda desse campo médio nos dá uma descrição mais razoável de várias propriedades nucleares. no entanto tais funções de onda quebram a simetria translacional.

Existem vários modos elaborados de incorporar correlações específicas nos sistemas de muitos nucleons, os quais, em geral, permitem obter resultados mais exatos comparados com os métodos de descrição que incorporam menos correlações e são tratados amplamente na literatura, em particular, se usam amplamente os métodos baseados na segunda quantização, exemplos são TDA, RPA e emparelhamento [1].

Quando falamos que o núcleo está localizado, indiretamente nós estamos usando considerações macroscópicas e clássicas. Do ponto de vista microscópico se requer considerar simetrias exatas, características quânticas, espectros discretos: transições entre estados quânticos excitados não são descritas corretamente num tratamento de campo médio, a função de onda produto é uma aproximação muito pobre de um estado de muitos corpos exato.

0.1.3 Interações nucleon-nucleon

Interações realísticas

Neste caso se trata de partir de interações N-N livres (ou no vácuo) com modificações necessárias para se descrever apropriados elementos de matriz nucleares no meio nuclear: esses são obtidos a partir de ajustes de observáveis de espalhamento N-N livre (deslocamentos de fase em todos os canais de reação e polarizações) usando ondas parciais que dão maior contribuição, ou seja S, P e D (exemplos são Hamada Johnston caroço duro e Reid caroço suave). A estrutura analítica da parte radial na distância $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \sim 2fm$ delas é similar ao chamado potencial de troca de um pion (OPEP), que tem a forma

$$V(r) = -\frac{e^{-\mu r}}{\mu r} \left(1 + \frac{3}{\mu r} + \frac{3}{(\mu r)^2}\right).$$

Os princípios gerais de invariância [1], os quais restringem a forma possível do potencial de interação, são

- i) paridade espacial
- ii) translação espacial
- iii) transformação de Galileo
- iv) troca de coordenadas
- v) inversão temporal
- vi) invariância rotacional (no espaço de coordenadas)
- vii) invariância rotacional (no espaço de spin e isospin).

Contudo, a forma radial exata não é determinada somente pelos princípios de invariância. É também importante a força central local que se representa do modo seguinte

$$V_C(1, 2) = V_0(r) + V_\sigma(r)\sigma^{(1)}\sigma^{(2)} + V_\tau(r)\tau^{(1)}\tau^{(2)} + V_{\sigma\tau}(r)\sigma^{(1)}\sigma^{(2)}\tau^{(1)}\tau^{(2)},$$

onde $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, $\sigma^{(i)}$ são os operadores de spin e $\tau^{(i)}$ os operadores de isospin.

É comum representar esta força central em termos dos operadores de troca de spin e isospin, que são respectivamente

$$P^{\sigma} = \frac{1}{2}(1 + \sigma^{(1)}\sigma^{(2)})$$

$$P^{\tau} = \frac{1}{2}(1 + \tau^{(1)}\tau^{(2)}),$$

logo

$$V_c = V_W(r) + V_M(r)P^{\sigma} + V_B(r)P^{\tau} + V_H(r)P^{\tau}P^{\sigma}.$$

Aqui

$$V_W = V_0 - V_{\sigma} - V_{\tau} + V_{\sigma\tau} \text{ (Wigner),}$$

$$V_M = -4V_{\sigma\tau} \text{ (Majorana),}$$

$$V_B = 2V_{\sigma} - 2V_{\sigma\tau} \text{ (Bartlett).}$$

e

$$V_H = -2V_{\tau} + 2V_{\sigma\tau} \text{ (Heisenberg).}$$

Estes potenciais não podem ser usados diretamente nos cálculos nucleares, a menos que se leve também em conta o meio nuclear (renormalização da força). Por outro lado, devido à forma particular que têm as interações realísticas, aparecem problemas devido à presença de um caroço fortemente repulsivo (o qual não permite usar métodos de teoria de perturbações como boa primeira aproximação). Há métodos elaborados, por exemplo o método de Bruckner-Hartree-Fock (BHF), nos quais o potencial realístico é substituído por uma matriz de interação efetiva G (mais recentemente foram introduzidas forças totalmente teóricas, como são os potenciais de Bonn e Paris que usam as contribuições de troca de vários mesons π , ω , ρ , ...etc).

Interações efetivas

Estas são descritas por potenciais simples com poucos parâmetros fenomenológicos, que são mais simples em comparação com os potenciais realísticos (sem ter que se fazer o complicado processo de adaptar as forças N-N livres ao núcleo), e que também são válidos numa ampla região de massa .

São definidos com uma forma radial simples, de tal maneira que levem a cálculos numericamente muito simples, determinando-se suas intensidades ou parâmetros de modo que a estrutura nuclear possa ser corretamente descrita: certos princípios de invariância são também incorporados. Exemplos são Yukawa $\frac{e^{-\mu r}}{\mu r}$, gaussiano $e^{-\mu r^2}$, delta $\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$, etc. Todas elas ilustram aspectos de interações N-N de curto alcance no núcleo (δ é uma forma extrema) [1].

Uma das características particularmente interessantes deste tipo de potencial é que, em geral, os elementos de matriz de dois corpos podem ser calculados em forma analítica usando funções de onda de partícula independente.

Simultaneamente, como se tem a necessidade de descrever também corretamente propriedades nucleares médias, a força correspondente deve estabelecer corretamente a propriedade de saturação, o que não é necessário para a descrição dos espectros de excitação do núcleo com alguns nucleons de valência; sua determinação também fixa a região de massa onde pode-se usar essa força.

As forças efetivas N-N são parametrizadas com um número relativamente pequeno de parâmetros, para serem válidas numa região de massa. Com a intenção de simular o efeito do meio nuclear também se adiciona uma contribuição geral no hamiltoniano que inclui forças de três corpos, ou seja,

$$H = \sum_{i=1}^A h(\vec{r}_i) + \sum_{i \neq j=1}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j) + \sum_{i \neq j \neq k=1}^A V(\vec{r}_i, \vec{r}_j, \vec{r}_k).$$

Também foram propostas forças efetivas com dependência explícita da energia e/ou momentos, as quais simulam não localidade temporal e espacial respectivamente (a

força de Skyrme apresenta não localidade espacial, a qual será tratada mais diante). Uma outra aproximação consiste em incluir termos dependentes da densidade local dos nucleons, os quais foram aplicados para descrever melhor as propriedades de saturação de um amplo número de núcleos finitos simultaneamente. Esta abordagem é descrita no trabalho de Negele [2]. Uma outra alternativa é usar forças separáveis, ou seja, forças que podem ser representadas como produtos nos quais cada fator atua sobre uma só partícula.

O problema de se levar em conta apropriadamente a interação entre os nucleons quando eles estão rodeados de outros nucleons (meio nuclear) é na realidade bem complexo. Assim, percebe-se a necessidade de se trabalhar com métodos aproximativos.

Face ao exposto, e em conexão com o problema das correlações entre os nucleons, nos restringiremos nessa dissertação a um aspecto da estrutura nuclear, a saber as distribuições de momentos e densidades nucleares.

As densidades e distribuição de momentos nucleares obtidas com o método variacional de estrutura nuclear para o estado fundamental, que não incorporam correlações suficientes, ao serem comparadas com os resultados experimentais para espalhamento elástico e-núcleo, apresentam grandes diferenças na região dos altos momentos transferidos; essa discrepância aponta para a necessidade de um tratamento mais detalhado que leve em conta mais correlações nos sistemas nucleares [7], [9]. Uma das maneiras de fazer isso é pelo uso do método de coordenadas geradoras que será considerado aqui. Os efeitos desse tratamento serão ilustrados com exemplos específicos mediante aplicação direta a casos de interesse. Os resultados obtidos com o método de coordenadas geradoras são comparados com o método variacional e também com dados experimentais. Para os cálculos fizemos uso das interações efetivas de Skyrme e de Gogny as quais, além de serem interações efetivas que dão boa descrição de propriedades nucleares, do ponto de vista prático facilitam os cálculos de nosso interesse.

Na seção 1 apresentaremos uma breve descrição geral do método de coordenadas geradoras que nos permitirá a construção de funções de onda correlacionadas. Na

seção 2 discutimos brevemente as interações efetivas que usaremos em nossa aplicação específica. e, continuando, na seção 3 descrevemos o procedimento de cálculo para a determinação das densidades espaciais e de momento nucleares. Na seção 4 desenvolvemos os cálculos específicos em forma analítica para determinar os núcleos do operador de superposição e de energia com interações de Skyrme e de Gogny. Na seção 5 descrevemos o procedimento de cálculo numérico para determinar as densidades espaciais e de momento, e finalmente na seção 6 apresentamos os resultados e conclusões.

1. O método de coordenadas geradoras

O método de coordenada geradoras (GCM) baseia-se em um procedimento para a construção de funções de onda estacionárias para sistemas de muitos nucleons. O ponto de partida desse método consiste no uso de funções de onda tentativas em um processo de superposição linear, por exemplo de determinantes de Slater construídos com funções de onda de partícula independente associadas a um dado potencial auxiliar parametrizado, o qual incorpora as características coletivas de interesse na função de onda total. Aquela função de onda para o sistema de muitos corpos é descrita então a partir do *ansatz*[12]:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) = \int f(\alpha) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha) d\alpha. \quad (1.1)$$

onde α é o parâmetro auxiliar chamado de coordenada geradora e a chamada função geradora $\Phi(\alpha) \equiv \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha)$ é a função de onda de muitos corpos dependente do parâmetro α , que é construída com funções de onda de partícula independente dependentes do parâmetro α , e $f(\alpha)$ é uma função peso a ser determinada a partir de um princípio variacional, i.e. ela é obtida da imposição de extremo (mínimo) do funcional de energia do sistema :

$$E[\Phi] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (1.2)$$

Aqui $\hat{H}$ é o hamiltoniano microscópico do sistema de nucleons. Ao impormos a condição $\delta E = 0$, nós obtemos uma equação integral para $f(\alpha)$, chamada equação de

Griffin-Wheeler [GW] [13]:

$$\int [H(\alpha, \alpha') - E I(\alpha, \alpha')] f(\alpha') = 0. \quad (1.3)$$

onde $H(\alpha, \alpha') \equiv \langle \Phi(\alpha) | \hat{H} | \Phi(\alpha') \rangle$ é o núcleo do operador de energia. $I(\alpha, \alpha') \equiv \langle \Phi(\alpha) | \Phi(\alpha') \rangle$ é o núcleo do operador de superposição, e E é o valor próprio da energia do movimento coletivo do sistema associado à coordenada geradora α (aqui usamos a notação $|\Phi(\alpha)\rangle \equiv \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha)$).

Em princípio, o GCM vai além da aproximação do campo médio, pois mistura muitos campos médios, um para cada valor do parâmetro α , por exemplo, pelo uso do modelo de camadas para a construção de cada determinante de Slater com funções de onda de partícula independente (Devemos mencionar, em princípio, que, dependendo das características coletivas e de simetria do sistema, pode-se usar mais de uma coordenada geradora com as correspondentes modificações triviais). Em certo sentido, também podemos dizer que o GCM vai além do tratamento de Hartree-Fock ao usar vários determinantes de Slater, se bem que o GCM não trata esses campos médios autoconsistentemente. É importante ressaltar também que o método não determina a priori qual deve ser o potencial médio construtor auxiliar, mas é conveniente escolhê-lo de modo que seja simples e de modo que o parâmetro α corresponda às características de interesse do sistema considerado que se quer estudar. Requer intuição física essa escolha do conjunto das funções de onda geradoras que sejam o suficientemente gerais para descrever a situação física, e também suficientemente simples para serem tratadas pelo método, ou seja, dado um conjunto fixo de funções geradoras, seremos capazes de descrever só uma certa classe de estados próprios do hamiltoniano H .

Na maioria dos casos nos baseamos na fenomenologia para a escolha dos parâmetros coletivos α_i como coordenadas geradoras. O conjunto de funções de prova $|\Psi\rangle$ contém só uma pequena parte do espaço de Hilbert total, mas esperamos ao menos ser capazes de descrever os modos coletivos de interesse que ocorrem no núcleo: isso só é possível se há uma clara distinção dos graus de liberdade relevantes.

Nós devemos considerar também que o GCM, que é um método totalmente quântico, formado a partir de uma construção de superposição linear de muitas funções de onda produto diferentes, nesse sentido é uma generalização do LCAO (combinação linear de orbitais), método usado na física molecular para funções de base continuamente parametrizada [1].

Desta forma, vê-se que o GCM permite incorporar ainda mais correlações do que somente aquelas associadas ao princípio de Pauli, e é um método híbrido macroscópico-microscópico, pois não abandona os aspectos microscópicos das interações que são manifestadas especificamente no hamiltoniano. Por outro lado, a característica coletiva aparece através do parâmetro α , associado ao potencial médio auxiliar que desaparece ao final dos cálculos no anatz para a função de onda total, sem aumentar, portanto, os graus de liberdade do sistema.

O método pode ser usado em uma variedade de problemas, como o tratamento adequado de simetrias em funções de onda de muitos corpos, representação de agregados em núcleos, espalhamento de partículas compostas etc.

Nós estaremos interessados, no que segue, em problemas de estados ligados; para situações físicas relacionadas a estados não ligados ver referência [Wong-75].

A parte crucial do método consiste em achar a solução da equação de GW, o que equivale a determinar a função peso $f(\alpha)$. Em alguns casos, dependendo de características específicas do núcleo de superposição, $f(\alpha)$ pode ser instável [3]. Essa dificuldade, em muitos casos, contudo, pode ser contornada através de uma transformação unitária que envolve a diagonalização do núcleo de superposição, a qual gera uma nova função $g(k)$, que é bem comportada. Essa transformação converte a equação de GW inicial em uma nova equação integral de valores próprios[?].

Na maioria dos casos, precisamos resolver a equação de GW numericamente. O procedimento, nessa situação, consiste em seguirmos os seguintes passos

- discretização das integrais na variável α convertendo a equação de GW numa

equação matricial.

- diagonalizar o núcleo de superposição I .
- obter um conjunto ortogonal de vetores próprios.
- após nos restringirmos aos vetores com valores próprios não nulos, e, por razões numéricas consideramos valores próprios maiores que ϵ .
- diagonalizar o hamiltoniano coletivo, obtendo as energias e funções peso, bem definidos para cada discretização.

Pequenos valores próprios na matriz de superposição $I(\alpha, \alpha')$ correspondem a uma aproximada dependência linear entre as funções geradoras; não tem sentido então aumentar o número de pontos na malha.

No caso especial onde a matriz $I(\alpha, \alpha')$ depende só da diferença $(\alpha - \alpha')$, podemos determinar as funções próprias $u_k(\alpha)$ do núcleo de superposição (sem discretizar) analiticamente; elas são tipo ondas planas, $u_k(\alpha) \sim e^{-ik\alpha}$, e seus valores próprios são $n_k = \int d\alpha I(\alpha, 0) e^{ik\alpha}$. Nesse caso, a expansão nos estados $u_k(\alpha)$ é uma transformada de Fourier. Quando o núcleo não pode ser analiticamente diagonalizado, frequentemente é possível aproximar $I(\alpha, \alpha')$ por algum $I_0(\alpha, \alpha')$ conhecido. Nesse caso se leva a cabo uma expansão nos estados próprios $u_k(\alpha)$ de $I_0(\alpha, \alpha')$; uma aproximação desse tipo frequentemente usada é conhecida como aproximação quadrática e núcleo de superposição gaussiano, quando $I(\alpha, \alpha') - I_0(\alpha, \alpha')$ é tratada como uma pequena correção, e o núcleo de energia é expandido em série de potências em $\alpha - \alpha'$ e se mantém até a segunda ordem somente. Esta aproximação usa a propriedade especial de serem $I(\alpha, \alpha')$ e $H(\alpha, \alpha')$ frequentemente agudas em $(\alpha - \alpha')$; nesse caso pode-se também transformar a equação de GW numa equação diferencial de segunda ordem do tipo de Schrödinger [1].

2. Interação nucleon-nucleon

Em conexão com a interação microscópica a ser usada no GCM, vamos apresentar, em seguida, dois casos de interesse.

2.1 Interação de Skyrme

Trata-se de uma interação efetiva muito usada em cálculos de estrutura e reações nucleares, por exemplo em simulação de colisões entre íons pesados e cálculos de Hartree-Fock, entre outros [2]. Esta interação é descrita por uma expressão parametrizada, baseada em uma interação microscópica realística N-N livre, contendo, adicionalmente, um termo de 3-corpos simulando o efeito do meio nuclear, o qual produz uma dependência na densidade [5].

Essa interação permite, por exemplo, a reprodução simultânea de características nucleares globais bem conhecidas como raios, energias de ligação, compressibilidade, etc, de vários núcleos finitos e da matéria nuclear. Há na literatura alguns conjuntos de parâmetros associados à interação de Skyrme conhecidos como SI, SII, SIII, etc., obtidos de ajustes de propriedades em núcleos diferentes e que são válidos para amplos conjuntos de núcleos que vão desde o ${}^4\text{He}$ até ${}^{280}\text{Pb}$.

A expressão adotada para cálculos nucleares de núcleos duplamente mágicos $N=Z$ tem a forma [6]:

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = t_0(1 + x_0 P_\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) +$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2}t_1(1+x_1P_\sigma)[\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\hat{k}+\hat{k}'\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)]+ \\
& t_2(1+x_2P_\sigma)\hat{k}'\cdot\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\cdot\hat{k}+\frac{1}{6}t_3(1+x_3P_\sigma)\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\rho^\sigma+ \\
& iW_0[\hat{k}'\times\delta(\vec{r}_1-\vec{r}_2)\cdot\hat{k}]\cdot(\vec{\sigma}_1+\vec{\sigma}_2),
\end{aligned} \tag{2.1}$$

onde $t_0, t_1, t_2, t_3, W_0, x_1, x_2$ e x_3 são parâmetros e:

$$\begin{aligned}
\hat{k} &= \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_{r_1}-\vec{\nabla}_{r_2}) \\
\hat{k}' &= \frac{1}{2i}(\vec{\nabla}_{r'_1}-\vec{\nabla}_{r'_2}).
\end{aligned}$$

Em particular, os parâmetros foram determinados ajustando os valores corretos de energias de ligação da matéria nuclear (NM) e de núcleos específicos, bem como também (E/A). Esses conjuntos são apresentados no apêndice 6.1.2. O valor de algumas outras propriedades nucleares importantes podem ser também previstas, em particular, a incompressibilidade nuclear K , massa efetiva m^* , densidade de equilíbrio ρ_0 , (ou seja, de expressões para essas propriedades nucleares [7], dadas por

$$\begin{aligned}
E/A &= \frac{\hbar^2}{2m}\beta\rho^{\frac{2}{3}} + \frac{3}{8}t_0\rho + \frac{1}{16}(3t_1+5t_2)\beta\rho^{\frac{5}{3}} + \frac{1}{16}t_3\rho^{1+\sigma} \\
K &= \frac{2\hbar^2}{2m}\beta\rho^{\frac{2}{3}} + \frac{9}{4}t_0\rho + \frac{5}{4}(3t_1+5t_2)\beta\rho^{\frac{5}{3}} + \frac{9}{16}(1+\sigma)(\sigma+\frac{2}{3})t_3\rho^{1+\sigma} \\
m^* &= m[1 + \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{16}(3t_1+5t_2)\rho]^{-1} \\
\frac{\partial}{\partial\rho}(E/A) &= \frac{2}{3}\frac{\hbar^2}{2m}\beta\rho^{-\frac{1}{3}} + \frac{3}{8}t_0 + \frac{5}{48}(3t_1+5t_2)\beta\rho^{\frac{2}{3}} + \frac{(1+\sigma)}{16}t_3\rho^{1+\sigma} = 0 \quad (2.2)
\end{aligned}$$

onde $\beta = \frac{3}{5}(\frac{3\pi^2}{2})^{\frac{2}{3}}$ e $\rho \equiv \rho(r)$ é a densidade espacial nuclear.)

2.2 Interação de Gogny

A interação de Gogny (D1) é uma outra interação N-N efetiva com muito sucesso que, diferentemente da interação de Skyrme, a qual é uma força de alcance nulo, pode sim-

ular também as partes de longo e médio alcance, permitindo descrever adequadamente correlações de emparelhamento em núcleos, e é descrita pela seguinte expressão [8]:

$$\begin{aligned}
 V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = & \sum_{i=1}^2 e^{-(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2 / \mu_i^2} (W_i + B_i P^\sigma - H_i P^\tau - M_i P^\sigma P^\tau) + \\
 & iW_0[\vec{k}' \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \cdot \vec{k}] \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) + \\
 & t_3(1 + P^\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)\rho^{\frac{1}{3}}\left(\frac{1}{2}(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)\right).
 \end{aligned} \tag{2.3}$$

Esta contém uma soma de duas gaussianas com misturas de troca de spin e isospin; também aqui os parâmetros foram ajustados a propriedades de alguns núcleos finitos, e da matéria nuclear, e são representados na tabela no apêndice.

A interação de Gogny D1 é também uma interação efetiva dependente da densidade, com alcance finito, fenomenológica no sentido que não tem relação direta com interações N-N realísticas, no entanto, os termos de mistura de spin e isospin permitem a obtenção da propriedade de saturação da matéria nuclear. O termo dependente da densidade permite obter considerável melhoramento nos resultados para as densidades de momentos e espacial de acordo com cálculos feitos com o método de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) [8] usando a interação efetiva D1 em núcleos esféricos (Interações independentes da densidade, como é bem conhecido, produzem baixas densidades próximas do nível de Fermi) .

3. Cálculo das densidades nucleares com o GCM : Aspectos gerais

Aqui, nosso interesse principal será o cálculo dos efeitos de correlações N-N, além daquelas de campo médio, na distribuição de momentos e densidade espacial para o estado fundamental de sistemas nucleares usando o GCM; os resultados serão comparado com as distribuições obtidas com outro cálculo que não leva em conta aquelas correlações de GCM, que nós chamaremos de variacional ou de modelo de camadas fechadas, e também com dados experimentais de espalhamento elástico através de fatores de forma num caso particular. Como é bem conhecido que não se tem uma boa descrição da distribuição de momentos na região de altos momentos, onde os tratamentos teóricos amplamente usados não têm tido muito sucesso em descrevê-la corretamente, lembremos que o modelo de camadas usando um certo campo médio, introduzido empiricamente pressupõe, a priori, a independência entre os estados de partícula independente, o que é, até certo ponto, consistente com as evidências da estrutura nuclear. No entanto, sabemos perfeitamente que os nucleons são os agentes que de alguma forma devem criar este campo médio: em princípio o campo médio deve ter sua origem nas interações microscópicas entre os núcleons, porisso devemos ir um passo além daquela aproximação do modelo de camadas colocando especificamente as interações microscópicas N-N e usando, por exemplo, a aproximação de Hatree-Fock, que permite, de maneira autoconsistente, deduzir qual deve ser o campo médio (local e não-local), o qual, em geral, dá uma melhor aproximação que os resultados do modelo de camadas. O tratamento HF assume que o

sistema é descrito por um único determinante de Slater (i.e., tomando em conta a correlação de Pauli); como os resultados mostram, em certas situações, esta aproximação ainda não é suficiente, por isso se deve ir além de HF na procura de uma descrição mais exata dos sistemas nucleares. Por outro lado, devemos ressaltar que o ponto de vista coletivo, em alguns casos, sendo mais intuitivo e usando poucos graus de liberdade, tem considerável sucesso e deveria ser também levado em conta de algum modo.

O GCM se presta justamente para levar em conta esses dois aspectos complementares de maneira mais direta, pelo menos no estudo de propriedades nucleares estáticas (Houve também intentos de generalizar o tratamento GCM com dependência temporal o qual, sem embargo, não foi muito usado [1]).

3.0.1 Densidade espacial nuclear

Como sabemos, os problemas de muitos-corpos só podem ser tratados usando certas aproximações simplificadoras, sendo que um dos modos de realizar isso, corresponde a incorporar correlações cada vez mais realísticas na função de onda de muitos corpos. Nesse sentido, nós estaremos interessados em usar o GCM, o qual, por tomar em conta mais correlações pela superposição de mais de um determinante de Slater, permite-nos construir uma melhor função de onda que descreve o sistema nuclear.

É útil analisar as ressonâncias gigantes monopulares isoescalares, os chamados modos de vibração de respiração com ($I^\pi = 0^+$), com energias aproximadas de 13-20MeV no GCM, uma vez que estes estados são bem estabelecidos experimentalmente, e são considerados vibrações de compressão nuclear. Seu estudo está relacionado com o problema da compressibilidade do núcleo finito e da matéria nuclear, e a descrição de tais estados está fortemente vinculada a características gerais do núcleo e é menos dependente de peculiaridades de estrutura nuclear. Esse problema permite a possibilidade de usar métodos macroscópicos e microscópicos ao estudar tais estados, em particular o método de GCM.

Assim, uma vez que se tenha a solução da equação integral de GW para esse prob-

lema, usaremos a função peso associada ao estado fundamental do sistema nuclear para construir a função de onda de muitos corpos que incorpora as correlações de interesse, ou seja, a melhor função de onda $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$, de tal modo que, embora $f_0(\alpha)$ possa apresentar instabilidades, nós calculamos a matriz densidade espacial de um corpo na forma :

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \int \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A) \Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}', \dots, \vec{r}_A) \underbrace{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A}_{(A-1) \text{ integrais}}. \quad (3.1)$$

Agora, usando o anatz de Griffin-Wheeler.

$$\rho(\vec{r}, \vec{r}') = \int \int f_0(\alpha) f_0(\alpha') I(\alpha, \alpha') \rho(\alpha, \alpha', \vec{r}, \vec{r}') d\alpha d\alpha' \quad (3.2)$$

onde

$$\rho(\alpha, \alpha', \vec{r}, \vec{r}') = \int \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha) \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}', \dots, \vec{r}_A; \alpha') \underbrace{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \dots d\vec{r}_A}_{(A-1) \text{ integrais}}. \quad (3.3)$$

3.0.2 Distribuição de momentos nuclear

Em princípio, a função $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A)$, construída com o GCM, contém uma enorme quantidade de informação sobre o sistema nuclear da qual só extraímos $\rho(\alpha, \alpha', \vec{r}, \vec{r}')$ que precisamos para conhecer $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$; a parte não diagonal dessa expressão dá correlações, associadas a uma não-localidade, que contribuirão diretamente para a distribuição de momentos $n(\vec{k}, \vec{k}')$. Esta é justamente a vantagem do GCM ao usar muitos determinantes de Slater, uma vez que nos permitirá a descrição simultânea de ambas densidades. Da mesma forma que antes :

$$n(\vec{k}, \vec{k}') = \int \tilde{\Psi}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_A) \tilde{\Psi}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}', \dots, \vec{k}_A) \underbrace{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 \dots d\vec{k}_A}_{(A-1) \text{ integrais}} \quad (3.4)$$

$$n(\vec{k}, \vec{k}') = \int \int f_0(\alpha) f_0(\alpha') I(\alpha, \alpha') n(\alpha, \alpha', \vec{k}, \vec{k}') d\alpha d\alpha' \quad (3.5)$$

onde

$$n(\alpha, \alpha', \vec{k}, \vec{k}') = \int \tilde{\Phi}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_A; \alpha) \tilde{\Phi}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}'_A; \alpha') \underbrace{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2 \dots d\vec{k}_A}_{(A-1) \text{ integrais}}, \quad (3.6)$$

sendo $\tilde{\Phi}(\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_A; \alpha)$ a transformada de Fourier em A dimensões da função $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha)$.

A informação dominante a respeito da densidade espacial e da distribuição de momentos do sistema nuclear é tirada então da parte diagonal de $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ e $n(\vec{k}, \vec{k}')$. As densidades locais são dadas diretamente por :

$$\rho(\vec{r}) = \int \int f_0(\alpha) f_0(\alpha') I(\alpha, \alpha') \rho(\alpha, \alpha', \vec{r}) d\alpha d\alpha' \quad (3.7)$$

e

$$n(\vec{k}) = \int \int f_0(\alpha) f_0(\alpha') I(\alpha, \alpha') n(\alpha, \alpha', \vec{k}) d\alpha d\alpha' ; \quad (3.8)$$

aqui $\rho(\vec{r}) \equiv \rho(\vec{r}, \vec{r})$, $n(\vec{k}) \equiv n(\vec{k}, \vec{k})$, $\rho(\alpha, \alpha', \vec{r}) \equiv \rho(\alpha, \alpha', \vec{r}, \vec{r})$ e $n(\alpha, \alpha', \vec{k}) \equiv n(\alpha, \alpha', \vec{k}, \vec{k})$.

A conexão entre essas distribuições é dada por :

$$n(\vec{k}) = \int \rho(\vec{r}, \vec{r}') e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} d\vec{r} d\vec{r}'. \quad (3.9)$$

Vamos agora nos referir aos efeitos das correlações sobre duas características principais do estado fundamental. que são a distribuição de momentos nuclear $n(k)$ e a densidade espacial $\rho(r)$. Existem vários métodos de introduzir correlações em funções de onda de muitos corpos e maneiras de calcular distribuições de momentos a partir de modelos em vários núcleos e em matéria nuclear. Por outro lado a informação real sobre $n(k)$ é extraídos a partir dos dados experimentais de reações partícula-núcleo .

Muita atenção há no estudo da distribuição de momentos e densidade espacial nuclear devido a que a amplamente usada teoria de HF permite descrever essas quan-

tidades. a qual sem embargo, não é muito sensível a correlações dinâmicas de curto alcance. que não são incluídas nessa teoria.

Já foi demonstrado também que é, em princípio, impossível descrever corretamente ambas quantidades simultaneamente no esquema de HF [7].

Uma característica dos sistemas nucleares que pode ser diretamente comparada com dados experimentais de espalhamento e-núcleo é o fator de forma dado por :

$$F[\vec{q}] = \int \rho(\vec{r}, \vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} d\vec{r}, \quad (3.10)$$

aqui $\vec{q}$ é o momento transferido e $\rho(\vec{r}, \vec{r}) \equiv \rho(\vec{r}) = 2\rho_{ch}(\vec{r})$. Na realidade, o que se mede nos dados do espalhamento elástico elétron-núcleo é o fator de forma de carga elétrica $F_{ch}[\vec{q}]$, embora aqui nós vamos considerar as densidades dos prótons e nêutrons iguais (nós sabemos, no entanto, que existe uma diferença muito pequena entre elas que não será discutida aqui [9]).

4. Aplicação do GCM para o cálculo de distribuições nucleares em núcleos mágicos leves

Nesta seção calcularemos as distribuições de momentos que nos proporcionam informação muito importante a respeito da estrutura do sistema de muitos corpos em interação.

Usaremos nesse capítulo o GCM para o cálculo de distribuição de momentos e de densidade nuclear, com uma única coordenada geradora α , que parametrizará estados de sistemas nucleares com simetria esférica. Estes estados corresponderão às chamadas ressonâncias gigantes de monopolo, ou modos de respiração dos núcleos, das quais se tem informação através de espectros de excitação nucleares (o que nos será útil para fazermos comparações com nossos resultados). Nesse caso, o GCM é particularmente simples quando é aplicado a núcleos duplamente mágicos ($Z=N$) leves, tais como ^4He , ^{16}O , ^{40}Ca , e se usa como potencial auxiliar o oscilador harmônico, sendo a coordenada geradora α o parâmetro do oscilador — no nosso caso particular $\alpha = (\frac{\hbar^2}{mw})^{\frac{1}{2}}$ — para o qual as expressões analíticas das funções de onda são bem conhecidas; ademais, o cálculo do núcleo do operador de superposição é grandemente simplificado permitindo-nos obter uma expressão analítica simples.

Por outro lado, o cálculo do núcleo do operador de energia é também simplificado quando se usa a interação efetiva de Skyrme, a qual é amplamente usada por possuir

poucos parâmetros, e em virtude de sua expressão envolver as distribuições δ de Dirac e porque contém um termo de três corpos que simula o efeito do meio nuclear, válido para um amplo conjunto de núcleos.

Outro potencial também importante e simples, já descrito em capítulo anterior, é a interação efetiva de Gogny a qual, por conter uma dependência radial gaussiana, permite realizar analiticamente as integrais do núcleo de energia: ela tem a vantagem adicional de ter um alcance finito, o que descreve melhor a parte de curto e médio alcance da interação nucleon-nucleon.

4.1 Cálculo do núcleo do operador de superposição

Usando propriedades gerais de integrais muito úteis envolvendo determinantes de Slater [10], nós sabemos que, dada uma base de funções de onda de partícula independente $\{\varphi_\mu(\vec{r}, \alpha)\}$, onde $\mu \equiv \{n, l, m\}$ são os números quânticos espaciais que caracterizam aqueles estados completamente, quando há degenerescência do spin-isospin, o núcleo de superposição é dado por :

$$I(\alpha, \alpha') = [N_{\lambda\mu}(\alpha, \alpha')]^4. \quad (4.1)$$

Aqui $N_{\lambda\mu}(\alpha, \alpha') \equiv \det \int \varphi_\lambda^*(\vec{r}, \alpha') \varphi_\mu(\vec{r}, \alpha) d\vec{r}$.

No nosso caso, $\varphi_\mu(\vec{r}, \alpha)$ são as funções de onda de partícula independente representadas pelas funções de onda do oscilador harmônico esférico em 3 dimensões (3D), que, sendo uma boa aproximação para o potencial do modelo de camadas, é um bom ponto de partida para os cálculos do GCM: em particular, é de interesse também porque nós estaremos interessados em descrever núcleos com simetria esférica.

Então, usando como base as funções de onda do oscilador harmônico esférico em 3D com parâmetro $\alpha = (\frac{\hbar^2}{mw})^{\frac{1}{2}}$, temos que:

$$\langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A | \alpha \rangle \equiv \langle \vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A | \Phi(\alpha) \rangle \equiv \Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha) \equiv$$

$$\det\{\varphi_\mu(\vec{r}_\nu, \alpha)\} \equiv \det \begin{vmatrix} \varphi_1(\vec{r}_1, \alpha) & \varphi_1(\vec{r}_2, \alpha) & \dots & \varphi_1(\vec{r}_A, \alpha) \\ \varphi_2(\vec{r}_1, \alpha) & \varphi_2(\vec{r}_2, \alpha) & \dots & \varphi_2(\vec{r}_A, \alpha) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_A(\vec{r}_1, \alpha) & \varphi_A(\vec{r}_2, \alpha) & \dots & \varphi_A(\vec{r}_A, \alpha) \end{vmatrix}.$$

As expressões analíticas para as funções de onda são explicitamente dadas como [9]:

$$\varphi_\mu(\vec{r}, \alpha) \equiv \varphi_{nlm}(\vec{r}, \alpha) = \sqrt{\frac{2\alpha^3 n!}{\Gamma(n+l+\frac{3}{2})}} \frac{R_{nl}(r\alpha)}{r\alpha} Y_{lm}(\theta, \phi). \quad (4.2)$$

$$R_{nl}(r\alpha) = \text{Exp}\left(-\frac{r^2\alpha^2}{2}\right)(r\alpha)^{l+1} L_n^{l+\frac{1}{2}}(r^2\alpha^2) \quad (4.3)$$

e, então

$$I(\alpha, \alpha') \equiv \langle \alpha | \alpha' \rangle = \left(\det \left\| \int \varphi_\lambda^*(\vec{r}, \alpha') \varphi_\mu(\vec{r}, \alpha) d\vec{r} \right\| \right)^4. \quad (4.4)$$

Usando uma nova variável:

$$\bar{\alpha}^2 = \frac{\alpha^2 + \alpha'^2}{2} \quad (4.5)$$

obteremos

$$N(\alpha, \alpha') \equiv \left(\frac{\alpha\alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^S$$

com $S = \frac{3}{2}$ para ${}^4\text{He}$, 9 para ${}^{16}\text{O}$ e 30 para ${}^{40}\text{Ca}$ ou equivalentemente

$$I(\alpha, \alpha') = \left(\frac{\alpha\alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^T.$$

com $T = 6$ para ${}^4\text{He}$, 36 para ${}^{16}\text{O}$, 120 para ${}^{40}\text{Ca}$ [?].

4.2 Cálculo do núcleo do operador de energia

Nós vamos desprezar, no que segue, as interações de Coulomb e a interação spin-órbita: também não faremos distinção alguma entre prótons e nêutrons que serão tratados como nucleons.

4.2.1 Caso de interação de Skyrme

As expressões para o núcleo do operador de energia são obtidos diretamente, usando as propriedades de fatorização e do produto escalar de determinantes de Slater e de elementos de matriz de operadores de um e dois corpos descritos no apêndice da referência [10]. Levando a cabo as integrações nas coordenadas e usando propriedades das distribuições delta (evitando-se assim ter que calcular elementos de matriz de dois-corpos complicados), se obtém uma expressão dependente só de densidades locais [?]:

$$H(\alpha, \alpha') = I(\alpha, \alpha') \cdot \int H(\vec{r}; \alpha, \alpha') d\vec{r}, \quad (4.6)$$

onde

$$H(\vec{r}; \alpha, \alpha') = \frac{\hbar^2}{2m} T + \frac{3}{8} t_0 \rho^2 + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) (\rho T + J^2) + \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) (\nabla \rho)^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho^{2+\sigma}, \quad (4.7)$$

sendo as densidades :

$$\rho \equiv \rho(\alpha, \alpha'; \vec{r}) = 4 \sum_{\mu}^{A/4} (N^{-1}(\alpha, \alpha'))_{\mu\lambda} \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}, \alpha) \varphi_{\mu}(\vec{r}, \alpha') \quad (4.8)$$

$$T \equiv T(\alpha, \alpha'; \vec{r}) = 4 \sum_{\mu}^{A/4} (N^{-1}(\alpha, \alpha'))_{\mu\lambda} \nabla \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}, \alpha) \nabla \varphi_{\mu}(\vec{r}, \alpha') \text{ e} \quad (4.8)$$

$$J \equiv J(\alpha, \alpha'; \vec{r}) = 4 \sum_{\mu}^{A/4} (N^{-1}(\alpha, \alpha'))_{\mu\lambda} [\varphi_{\lambda}^*(\vec{r}, \alpha) \nabla \varphi_{\mu}(\vec{r}, \alpha') - \nabla \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}, \alpha) \varphi_{\mu}(\vec{r}, \alpha')] \quad (4.9)$$

$$\nabla \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}, \alpha) \varphi_{\mu}(\vec{r}, \alpha')] \quad (4.10)$$

respectivamente.

O cálculo do núcleo do operador de energia é facilitado pelo uso da nova variável $\bar{\alpha}$, de modo que, definindo

$$\rho_0(\vec{r}, \vec{r}'; \bar{\alpha}) = 4 \sum_{\mu}^{A/4} \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}, \bar{\alpha}) \varphi_{\mu}(\vec{r}', \bar{\alpha}) \quad (4.11)$$

temos

$$\rho_0(\vec{r}, \vec{r}'; \alpha, \alpha') = e^{\chi(\vec{r}; \alpha, \alpha') - \chi(\vec{r}'; \alpha, \alpha')} \rho_0(\vec{r}, \vec{r}'; \bar{\alpha}), \quad (4.12)$$

onde

$$\begin{aligned} \chi(\vec{r}; \alpha, \alpha') &= \frac{r^2}{2}(\alpha^2 - \alpha'^2) \\ \chi(\vec{r}'; \alpha, \alpha') &= \frac{r'^2}{2}(\alpha^2 - \alpha'^2). \end{aligned} \quad (4.13)$$

Com esses resultados obtemos

$$\begin{aligned} H(\vec{r}, \alpha, \alpha') &= \frac{\hbar^2}{2m} [T_0(\vec{r}, \vec{r}) + \rho_0(\vec{r}, \vec{r}) [\nabla \chi(\vec{r})]^2] + \\ &\quad \frac{3}{8} t_0 \rho_0^2(\vec{r}, \vec{r}) + \frac{1}{16} (3t_1 + 5t_2) (\rho_0(\vec{r}, \vec{r}) T_0(\vec{r}, \vec{r}) + \\ &\quad \frac{1}{64} (9t_1 - 5t_2) [\nabla \rho_0(\vec{r}, \vec{r})]^2 + \frac{1}{16} t_3 \rho_0^{2+\sigma}(\vec{r}, \vec{r}). \end{aligned} \quad (4.14)$$

O sub-índice "0" indica densidade com um único parâmetro $\bar{\alpha}$. Ao se integrar a expressão acima diretamente, explicitando $\bar{\alpha}$, se obtém a expressão algébrica (devido a forma particular gaussiana das funções de onda do oscilador harmônico) facilitando-nos grandemente os cálculos na aplicação do princípio variacional.

$$\begin{aligned} \int H(\vec{r}, \alpha, \alpha') d\vec{r} &= \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \bar{\alpha}^2 + \left[\frac{3t_0 d_0 \bar{\alpha}^3}{2(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \right] + \\ &\quad \left[\frac{(3t_1 + 5t_2) h_0}{8(2\pi)^{\frac{3}{2}}} + \frac{(9t_1 - 5t_2) g_0}{16(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \right] \bar{\alpha}^5 + \\ &\quad \frac{4t_3 f_0}{(\pi\sqrt{3})^3} \bar{\alpha}^6 - \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \frac{(\alpha^2 - \alpha'^2)^2}{4\bar{\alpha}^2}. \end{aligned} \quad (4.15)$$

As constantes são definidas segundo os resultados das integrais:

$$\begin{aligned}
 \int T_0(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) d\vec{r} &= \int \rho_0(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) r^2 d\vec{r} = C_1 \bar{\alpha}, \\
 \int \rho_0^2(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) r^2 d\vec{r} &= C_2 \bar{\alpha}^3 = \frac{4d_0}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \bar{\alpha}^3, \\
 \int \rho_0^3(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) d\vec{r} &= C_3 \bar{\alpha}^6 = \frac{64f_0}{8(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \bar{\alpha}^6, \\
 \int [\nabla \rho_0(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha})]^2 d\vec{r} &= C_4 \bar{\alpha}^5 = \frac{4g_0}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \bar{\alpha}^5
 \end{aligned} \tag{4.16}$$

e

$$\int \rho_0(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) T_0(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) d\vec{r} = C_5 \bar{\alpha}^5 = \frac{2h_0}{(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \bar{\alpha}^5.$$

Os valores C_1, d_0, g_0, h_0, f_0 , estão devidamente tabulados no apêndice, dando para o núcleo de energia finalmente:

$$\begin{aligned}
 \langle \alpha' | \hat{H} | \alpha \rangle &= \left(\frac{2\alpha\alpha'}{\alpha^2 + \alpha'^2} \right)^T \left\{ \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \bar{\alpha}^2 + \left[\frac{3t_0 d_0 \bar{\alpha}^3}{2(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \right] + \right. \\
 &\quad \left[\frac{(3t_1 + 5t_2)h_0}{8(2\pi)^{\frac{3}{2}}} + \frac{(9t_1 - 5t_2)g_0}{16(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \right] \bar{\alpha}^5 + \\
 &\quad \left. \frac{4t_3 f_0}{(\pi\sqrt{3})^3} \bar{\alpha}^6 - \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \left(\frac{\alpha^2 - \alpha'^2}{4\bar{\alpha}^2} \right) \right\}.
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

As expressões do núcleo do operador de superposição e de energia podem ser simplificadas ainda mais se nós fizermos a mudança de variável [3] (para podermos dispor de um núcleo de superposição dependente da diferença, o qual, por possuir invariância translacional, admite transformada de Fourier analítica, a qual será a transformação unitária que precisamos para diagonalizá-lo e permitir-nos resolver a equação integral de GW, contornando, assim, o problema da instabilidade da função peso $f(\alpha)$), com a transformação:

$$\alpha = \alpha_0 e^x, \tag{4.18}$$

onde α_0 , é um fator de escala com as dimensões e unidades apropriadas: no que segue nós tomaremos α_0 como nossa unidade de distâncias ($\alpha_0 = 1 \text{ fm}^{-1}$).

Consideramos finalmente uma correção aproximada do movimento do centro de massa que consiste na inclusão do fator $(\frac{A-1}{A})$, sendo A o número de massa do núcleo. no coeficiente do termo de energia cinética: tal correção é exata no caso o ${}^4\text{He}$ e aproximada para nucleos mágicos mas pesados como ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$ [17]. Neste caso nós temos

$$\begin{aligned} I(\alpha, \alpha') &\longrightarrow I(x, x') = \sec h^T(x - x') \\ H(\alpha, \alpha') &\longrightarrow H(x, x') = \sec h^T(x - x') [B \sec h(x - x') e^{(x+x')} + \\ &\quad C \cos h^{\frac{3}{2}}(x - x') e^{\frac{3}{2}(x+x')} + D \cos h^{\frac{5}{2}}(x - x') e^{\frac{5}{2}(x+x')} + \\ &\quad E \cos h^3(x - x') e^{3(x+x')}] \end{aligned} \quad (4.19)$$

onde

$$\begin{aligned} B &= \frac{\hbar^2}{2m} 2C_1 \cdot \frac{(A-1)}{A} \\ C &= \frac{3t_0 d_0}{2(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \\ D &= \frac{(3t_1 + 5t_2)h_0}{8(2\pi)^{\frac{3}{2}}} + \frac{(9t_1 - 5t_2)g_0}{16(2\pi)^{\frac{3}{2}}} \\ E &= \frac{4t_3 f_0}{(\pi\sqrt{3})^3} \end{aligned} \quad (4.20)$$

4.2.2 Caso da Interação de Gogny

Para esta interação (por simplicidade nos restringiremos ao caso do ${}^4\text{He}$) também é possível a fatorização do núcleo de superposição que será o mesmo que no caso de Skyrme. pois o núcleo de superposição contém somente informação sobre a cinemática. por outro lado, o núcleo de energia contém informação sobre a dinâmica. Assim, o

núcleo de superposição usando $b = \alpha^{-1}$ é

$$\langle \alpha' | \alpha \rangle = \left(\frac{2\alpha\alpha'}{\alpha^2 + \alpha'^2} \right)^6 = \left(\frac{2bb'}{b^2 + b'^2} \right)^6 = \left(\frac{\alpha\alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^6$$

e. como na eq. 4.1.

$$(N_{0,0}^{-1})^2 = \left(\frac{2bb'}{b^2 + b'^2} \right)^{-3} = \left(\frac{\alpha\alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^{-3}.$$

O termo de um corpo, ou seja, a energia cinética, também é a mesma que no caso anterior. Com a correção do c.m. essa contribuição fica

$$T(b, b') = \left(\frac{\alpha\alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^6 2C_1 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(\alpha\alpha')^2}{\bar{\alpha}^2} \frac{3}{4}.$$

Usando agora a expressão para os elementos de matriz de dois corpos do apêndice da referência [10], sendo H_1 o termo de dois corpos com dependência gaussiana,

$$\begin{aligned} \langle \alpha' | \hat{H}_1 | \alpha \rangle &= \langle \alpha' | e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu^2}} (W + BP_\sigma - HP_\tau - MP_\sigma P_\tau) | \alpha \rangle \\ &= \langle \alpha' | \alpha \rangle \langle \varphi_0 \varphi_0 | e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu^2}} | \varphi_0 \varphi_0 \rangle (6W + 6M)(N_{0,0}^{-1})^2, \end{aligned}$$

representando φ_0 a função de onda orbital do ${}^4\text{He}$ no estado fundamental. Então, devemos calcular estes elementos de matriz de dois corpos do operador de energia potencial como integrais gaussianas: para isso usamos coordenadas cartesianas aproveitando que é possível separar as integrais. O resultado da integração parcial numa direção é:

$$e = \frac{1}{\sqrt{\pi}b_1\sqrt{\pi}b_2} \int \int e^{-\frac{u_1^2}{2b_1^2} - \frac{u_2^2}{2b_2^2}} e^{-\frac{(u_1 - u_2)^2}{\mu^2}} e^{-\frac{u_1^2}{2b_1^2} - \frac{u_2^2}{2b_2^2}} du_1 du_2 = \frac{\xi^2 \mu}{b_1 b_2 \sqrt{\mu^2 + 2\xi^2}};$$

aqui $\xi^2 = \frac{2b_1^2 b_2^2}{b_1^2 + b_2^2}$ e então, na diagonal, $b_1 = b_2$

$$e = \frac{\mu}{\sqrt{\mu^2 + 2\xi^2}}.$$

O elemento de matriz espacial é :

$$\langle \varphi_0 \varphi_0 | e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu^2}} | \varphi_0 \varphi_0 \rangle = e^3 = \frac{\xi^6 \mu^3}{b_1^3 b_2^3 (\mu^2 + 2\xi^2)^{\frac{3}{2}}}$$

$$= \frac{2^3 b_1^3 b_2^3 \mu^3}{(b_1^2 + b_2^2)^3 (\mu^2 + \frac{4b_1^2 b_2^2}{b_1^2 + b_2^2})^{\frac{3}{2}}} = \left(\frac{\alpha \alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^3 \frac{\mu^3}{(\mu^2 + \frac{2}{\bar{\alpha}^2})^{\frac{3}{2}}}$$

e o termo de dois-corpos será finalmente

$$\langle \alpha' | \hat{H}_2 | \alpha \rangle = \left(\frac{\alpha \alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^6 \frac{6\mu^3 (W + M)}{(\mu^2 + \frac{2}{\bar{\alpha}^2})^{\frac{3}{2}}}.$$

O termo dependente da densidade é calculado integrando-se diretamente, usando a propriedade da função delta, dando-nos como resultado

$$H_3 = \left(\frac{\alpha \alpha'}{\bar{\alpha}^2} \right)^6 \frac{6t_3 d}{16} (\bar{\alpha})^4;$$

aqui a constante d é determinada segundo a expressão:

$$\int \rho_0^{\frac{7}{3}}(\vec{r}, \vec{r}, \bar{\alpha}) d\vec{r} = d\bar{\alpha}^4.$$

Finalmente, usando, como antes, a variável $\alpha = \alpha_0 e^x$, teremos a expressão do núcleo de energia:

$$\begin{aligned} H(x, x') = & (\sec h(x - x'))^6 [A \sec h(x - x') e^{(x+x')} + \\ & 6(W_1 + M_1) \frac{\mu_1^3}{(\mu_1^2 + 2 \sec h(x - x') e^{-(x+x')})^{\frac{3}{2}}} + \\ & 6(W_2 + M_2) \frac{\mu_2^3}{(\mu_2^2 + 2 \sec h(x - x') e^{-(x+x')})^{\frac{3}{2}}} + \\ & D(\cosh(x - x'))^2 e^{2(x+x')}], \end{aligned}$$

com $A = 93.52$, $D = \frac{6t_3 d}{16}$ e $d = 0.722008$.

5. Cálculo numérico das distribuições nucleares usando o GCM

Para o tratamento numérico do problema, nós temos que fazer uma discretização da coordenada geradora x para podermos trabalhar com matrizes (e vetores).

A equação integral de GW, sendo então, na nova coordenada geradora

$$\int [H(x, x') - E I(x, x')] f(x') = 0, \quad (5.1)$$

tem a forma discretizada

$$\sum_{j=1}^N [H(x_i, x_j) - E I(x_i, x_j)] f(x_j) = 0. \quad (5.2)$$

Usando a notação de matrizes e vetores

$$\begin{aligned} x &\longrightarrow x_i \\ f(x) &\longrightarrow f(x_i) \longrightarrow \tilde{f} \\ H(x, x') &\longrightarrow H(x_i, x_j) \longrightarrow \hat{H} \\ I(x, x') &\longrightarrow I(x_i, x_j) \longrightarrow \hat{I} \end{aligned} \quad (5.3)$$

teremos

$$(\hat{H} - E \hat{I}) \tilde{f} = 0. \quad (5.4)$$

Como a resolução direta desta equação pode apresentar problemas por causa do espectro de valores próprios de $\hat{I}$, uma vez que ele pode ter autovalores muito pequenos, nós não podemos simplesmente inverter $\hat{I}$ para obter uma equação de valores próprios como é usual. Para contornarmos esse problema, nós fazemos uma transformação dos núcleos dos operadores de tal forma que diagonalizamos $\hat{I}$ e truncamos, se for necessário, nos valores próprios pequenos (adotando-se para este fim um critério que garanta a estabilidade numérica dos resultados: em nosso cálculo usamos 20 pontos na malha e valores próprios menores que 10^{-8} foram desconsiderados). Esse procedimento corresponde a partir da equação (5.4) e considerar $\hat{U}$, uma matriz unitária, $\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{U} \hat{U}^+ = \hat{I}$, que, diagonalizando $\hat{I}$, transforma a equação (5.4)

$$(\hat{U}^+ \hat{H} \hat{U} - E \hat{U}^+ \hat{I} \hat{U}) \hat{U}^+ \tilde{f} = 0. \quad (5.5)$$

Aqui

$$\hat{U}^+ \hat{I} \hat{U} = \hat{\Lambda}, \quad (5.6)$$

onde $\hat{\Lambda}$ é uma matriz diagonal.

Da equação

$$(\hat{U}^+ \hat{H} \hat{U} - E \hat{\Lambda}) \hat{U}^+ \tilde{f} = 0, \quad (5.7)$$

tomando a raiz quadrada da matriz diagonal $\hat{\Lambda} = \hat{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \hat{\Lambda}^{\frac{1}{2}}$, e multiplicando à esquerda por $\hat{\Lambda}^{-\frac{1}{2}}$, obtemos

$$(\hat{\Lambda}^{-\frac{1}{2}} \hat{U}^+ \hat{H} \hat{U} \hat{\Lambda}^{-\frac{1}{2}} - E \hat{I}) \hat{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \hat{U}^+ \tilde{f} = 0. \quad (5.8)$$

Definindo $\tilde{g} = \hat{\Lambda}^{\frac{1}{2}} \hat{U}^+ \tilde{f}$ e $\hat{V} = \hat{\Lambda}^{-\frac{1}{2}} \hat{U}^+$, a equação transformada é escrita finalmente como

$$(\hat{K} - E \hat{I}) \tilde{g} = 0, \quad (5.9)$$

com $\hat{K} = \hat{V} \hat{H} \hat{V}^+$. Esta é uma equação de valores próprios usual para $\tilde{g}$, com um novo núcleo de energia. Devemos primeiro resolvê-la para obtermos as $\tilde{g}$'s (com os

correspondente E 's) a partir das quais podemos obter as f 's, que são as funções que nos interessam para o cálculo das distribuições. Usando a relação $\tilde{f} = \hat{V}^+ \tilde{g}$, todos estes cálculos e os intermediários foram feitos em um programa usando computação algébrica (em particular, usamos o programa Mathematica) .

6. Resultados e Conclusões

6. Resultados e Conclusões

Nesta dissertação estudamos a introdução de correlações de mais de um corpo na função de onda de muitos corpos através do GCM. Com isso estudamos o efeito daquela introdução na densidade nuclear e na distribuição de momentos dos nucleons em núcleos duplamente mágicos leves. Este tratamento permite ir além da abordagem do modelo de camadas.

Como a distribuição de momentos $n(k)$ é sensível às correlações de curto alcance que refletem as características da força N-N a pequenas distâncias, aqui argumenta-se que uma descrição correta deve ser achada nas abordagens dos métodos de correlações nucleares.

É sabido que a parte atrativa de longo alcance da interação N-N é responsável pela forma detalhada de $n(k)$ a baixos momentos ($k \leq k_F$, sendo k_F o momento de Fermi), enquanto que o comportamento de $n(k)$ a altos momentos ($k \geq k_F$) depende dos efeitos do caroço e da parte atrativa a curtas distâncias.

O modelo de camadas descreve muito bem a região de baixos momentos ($k \leq k_F$) uma vez que o campo médio tem comportamento bastante realístico na superfície, e aí as funções de onda de partícula independente têm componentes de altos momentos que não são dominantes: de fato, no modelo de camadas, dois nucleons não podem adquirir altos momentos através da interação mútua, pois é difícil para eles estarem muito próximos entre si: isso leva a previsões não realísticas para a parte dos altos momentos ($k \geq k_F$) da distribuição $n(k)$.

A distribuição de momentos só pode ser bem descrita nessa região quando se incluem

os efeitos de correlações a distâncias curtas.

As componentes de altos momentos no GCM com oscilador harmônico se devem a existência de estados intermediários com altas densidades. Isso quer dizer que, nesses estados, as distâncias entre os nucleons são pequenas e as forças de curto alcance são operativas.

Os cálculos foram realizados numericamente mediante programa em Mathematica. Eles mostram modificações com respeito ao método variacional, associadas aos efeitos de correlações do GCM na região de altos momentos $k > 2.5 \text{ fm}^{-1}$, para ambas interações de Skyrme e de Gogny, sendo os efeitos muito pequenos para o ^{40}Ca . Dessa forma não apresentaremos os resultados relativos ao ^{40}Ca . Obtém-se um melhor acordo com os dados experimentais do fator de forma elétrico no caso de ^4He .

Na figura 1 representamos o fator de forma de carga $F(q^2)$ experimentalmente medido [27], para o caso do ^4He que usaremos como referência para comparação. Nas figuras 2 e 3 temos as funções peso do GCM para o caso do ^4He com interações de Skyrme e Gogny respectivamente, na figura 4 mostramos em conjunto as densidades espaciais, calculadas com o método variacional, GCM com Skyrme III e Gogny para o ^4He . Na figura 5 mostramos as correspondentes distribuições de momentos variacional, GCM com Skyrme e Gogny também para o ^4He . Na figura 6 os fatores de forma experimental, GCM com Skyrme III e GCM com Gogny para o ^4He ; finalmente para o caso do ^{16}O apresentamos na figura 7 as densidades espaciais calculadas com o método variacional e com o GCM com Skyrme III. Nas figuras 8 e 9 são mostrados respectivamente as distribuições de momento variacional e Skyrme III e seus correspondentes fatores de forma.

Com relação aos resultados devemos resumir o seguinte:

- comparando os efeitos da introdução de correlações na função de onda do estado fundamental segundo o esquema do GCM com o método variacional (sem correlação), observam-se diferenças na região dos altos momentos transferidos, de tal

modo que funções de onda do GCM representam melhor os dados experimentais do fator de forma. Aquelas diferenças são mais apreciáveis para o ${}^4\text{He}$ sendo muito pequenas para o ${}^{16}\text{O}$ e ${}^{40}\text{Ca}$.

- observamos também que não há diferença essencial nas distribuições de momentos entre os diferentes conjunto de parâmetros de Skyrme.
- como a inclusão de estados intermediários $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha)$ apresenta efeitos sobre a distribuição de momentos, pode-se esperar que, usando interações microscópicas mais realísticas, possa-se representar mais exatamente as distribuições nucleares.
- o GCM permite a descrição simultânea de $\rho(\vec{r})$, $n(\vec{k})$ e também da energia e raios do estado fundamental dos primeiros estados excitados.
- o GCM é sensível ao potencial auxiliar: diferentes escolhas dão diferentes resultados para distribuições nucleares.
- consideramos que deve ser necessário introduzir adicionalmente novos vínculos no ansatz do GCM para que se elimine, na função de onda $\Phi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_A; \alpha)$, contribuições do centro de massa que só foram retiradas no termo de energia cinética.
- na presente dissertação fizemos uso extensivo de resultados analíticos e propriedades de funções de tipo gaussiano que permitem realizar as integrais e também as propriedades dos determinantes de Slater, simplificando os cálculos de modo importante.
- importante informação também deve estar contida na matriz densidade de um corpo $\rho(\vec{r}, \vec{r}')$ com correlações do GCM, especialmente a parte fora da diagonal $\vec{r} \neq \vec{r}'$, a qual poderia ser diagonalizada para obter os chamados orbitais naturais.

6.1.2 Parâmetros das interações de Skyrme

	$t_0[\text{MeVfm}^3]$	$t_1[\text{MeVfm}^5]$	$t_2[\text{MeVfm}^5]$	$t_3[\text{MeVfm}^6]$	x_0	$W_0[\text{MeVfm}^5]$
SI	-1057.3	235.9	-100.0	14463.5	0.56	120.0
SII	-1169.9	586.6	-27.1	9331.1	0.34	105,0
SIII	-1128.75	395,0	-95.0	14000.0	0.45	120.0
SIV	-1205.6	765.0	35,0	5000.0	0.05	150,0
SV	-1248.29	970.56	107.22	0,0	-0.17	150.0
SVI	-1111.81	271.67	-138.33	17000.0	0,583	115.0

6.1.3 Parâmetros da interação de Gogny

i	$\mu_i[fm]$	W_i	B_i	H_i	M_i	$W_0 = 115[\text{MeVfm}^5]$ $t_3 = 1350[\text{MeVfm}^4]$
1	0.7	-402.4	-100	-496.2	-23.56	
2	1.2	-21.30	-11.77	37.27	-68.81	

6.1.4 Coeficientes do núcleo de energia com a interação de Skyrme

	C_1	d_0	g_0	h_0	f_0	$E_0[\text{Mev}]$
^4He	3	4	12	6	1	-27
^{16}O	18	31	57	$\frac{249}{2}$	$\frac{116}{9}$	-139
^{40}Ca	60	$\frac{1945}{16}$	$\frac{2595}{16}$	$\frac{23715}{32}$	$\frac{2060}{27}$	-401

6.1.5 Figuras

Figura 1 - Fator de forma He-4 experimental (Referência Frosh)

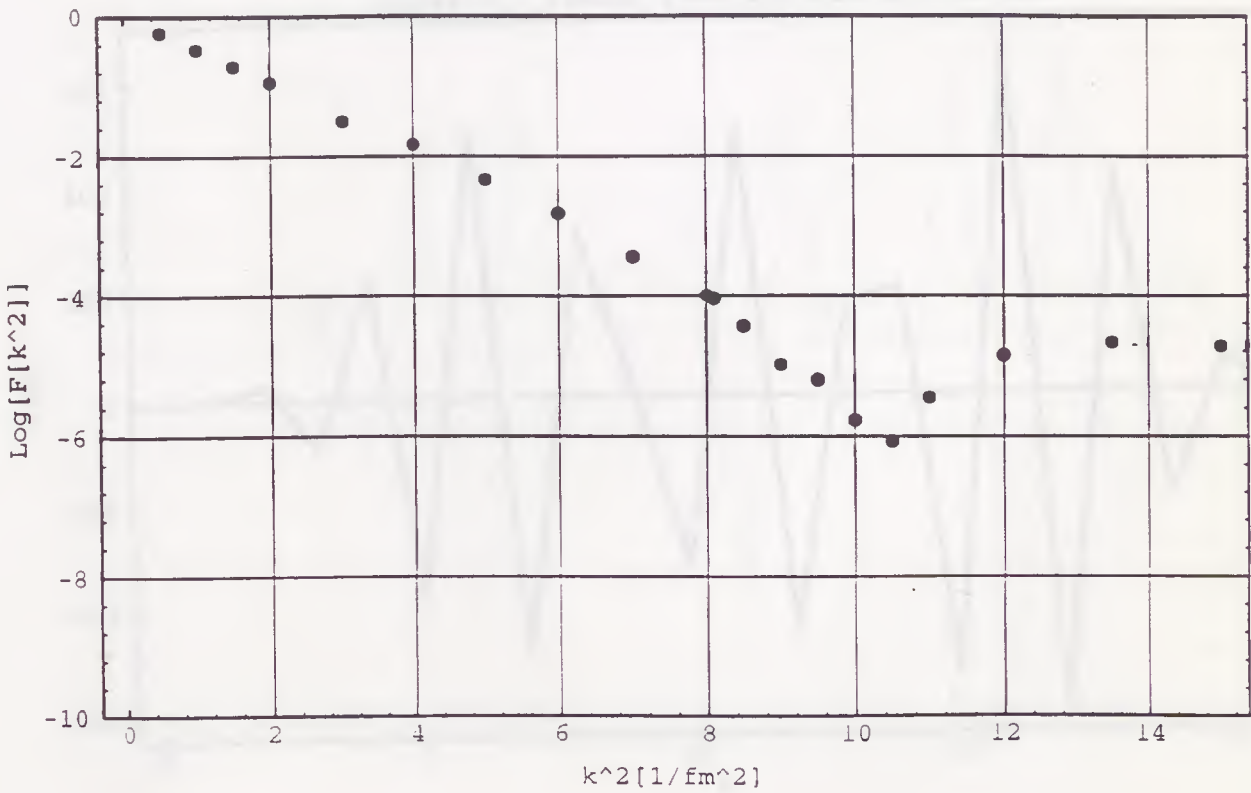


Figura 2 - função peso GCM com Skyrme III

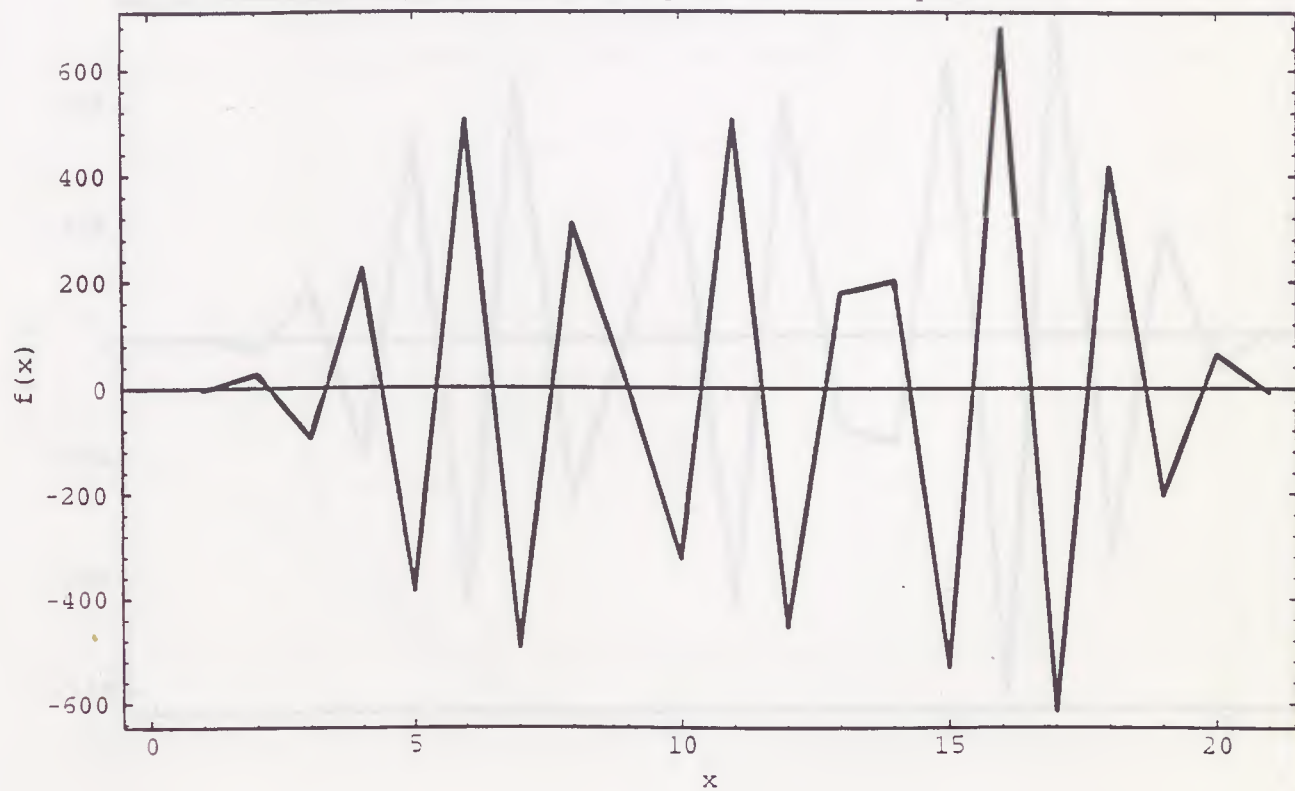


Figura 3 - função peso GCM com Gogny

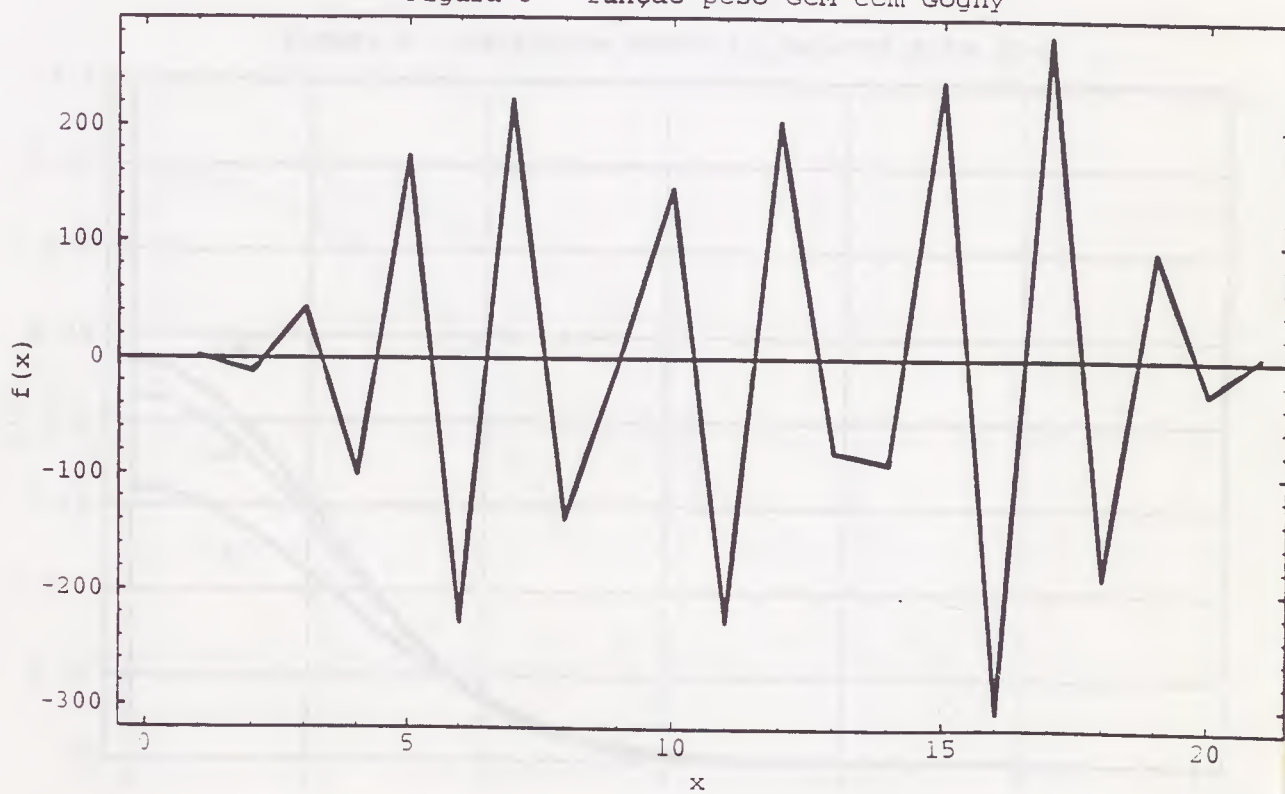
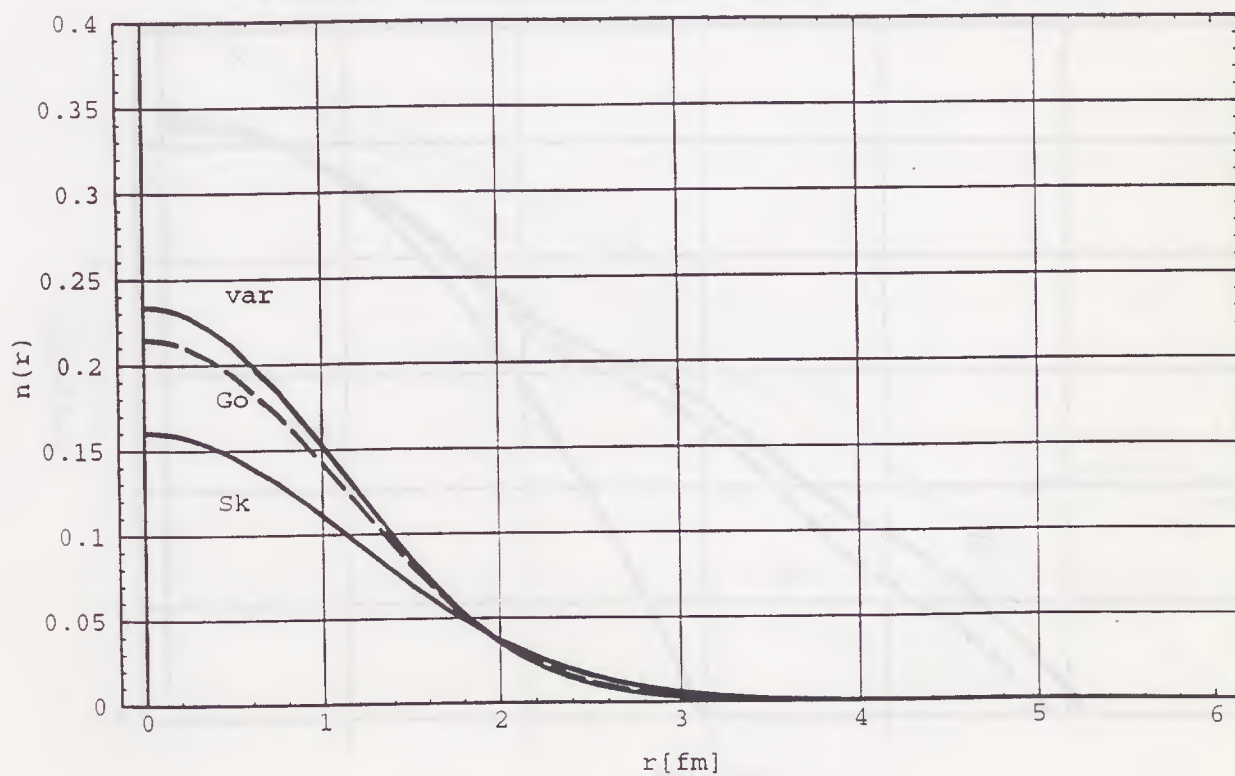


Figura 4 - Densidade espacial nuclear para He-4



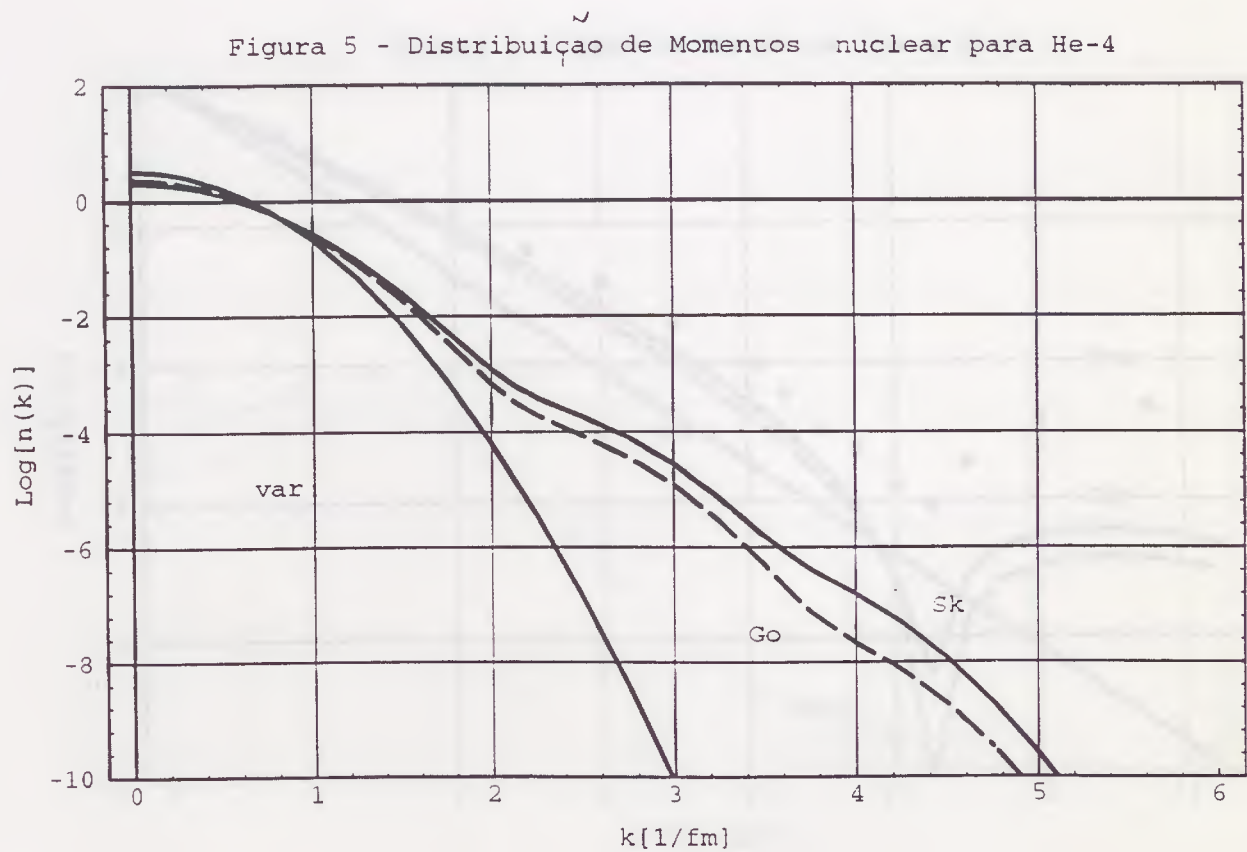


Figura 6 - Fatores de forma para He-4

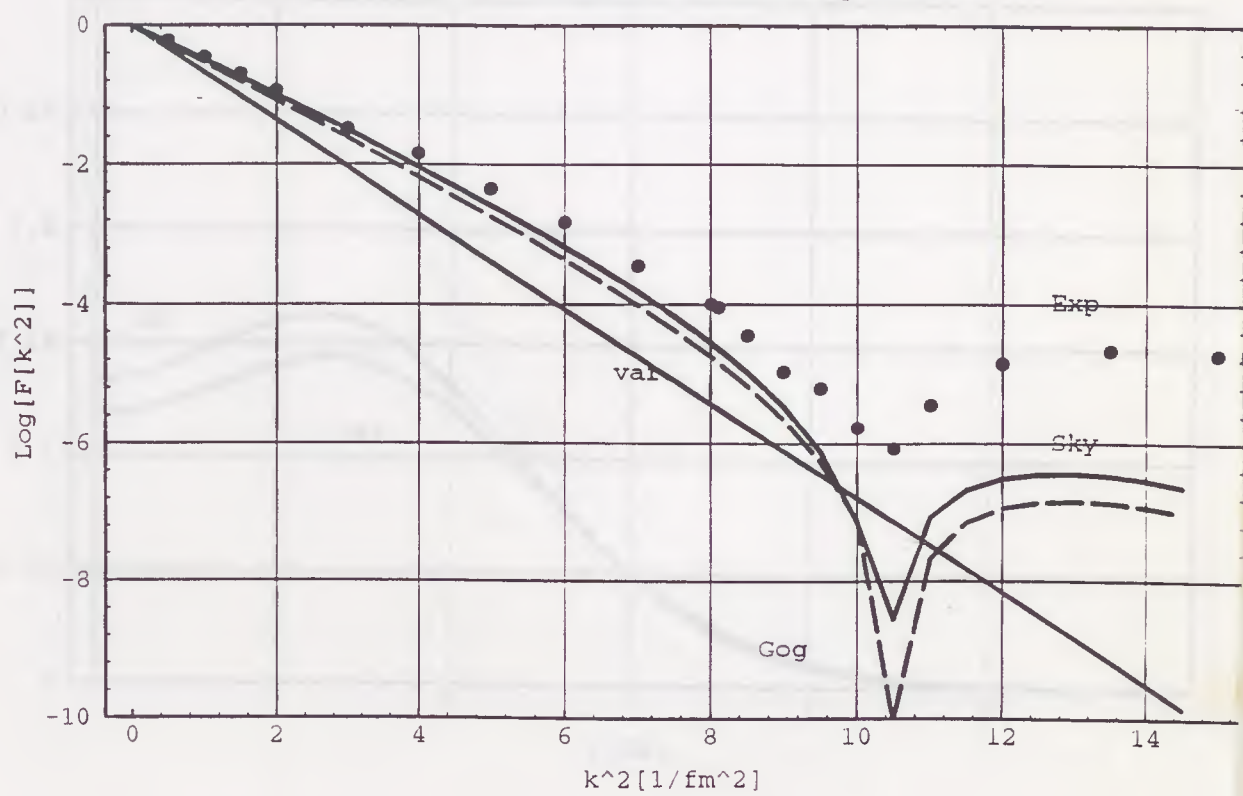


Figura 7 - Densidades espaciais para O-16

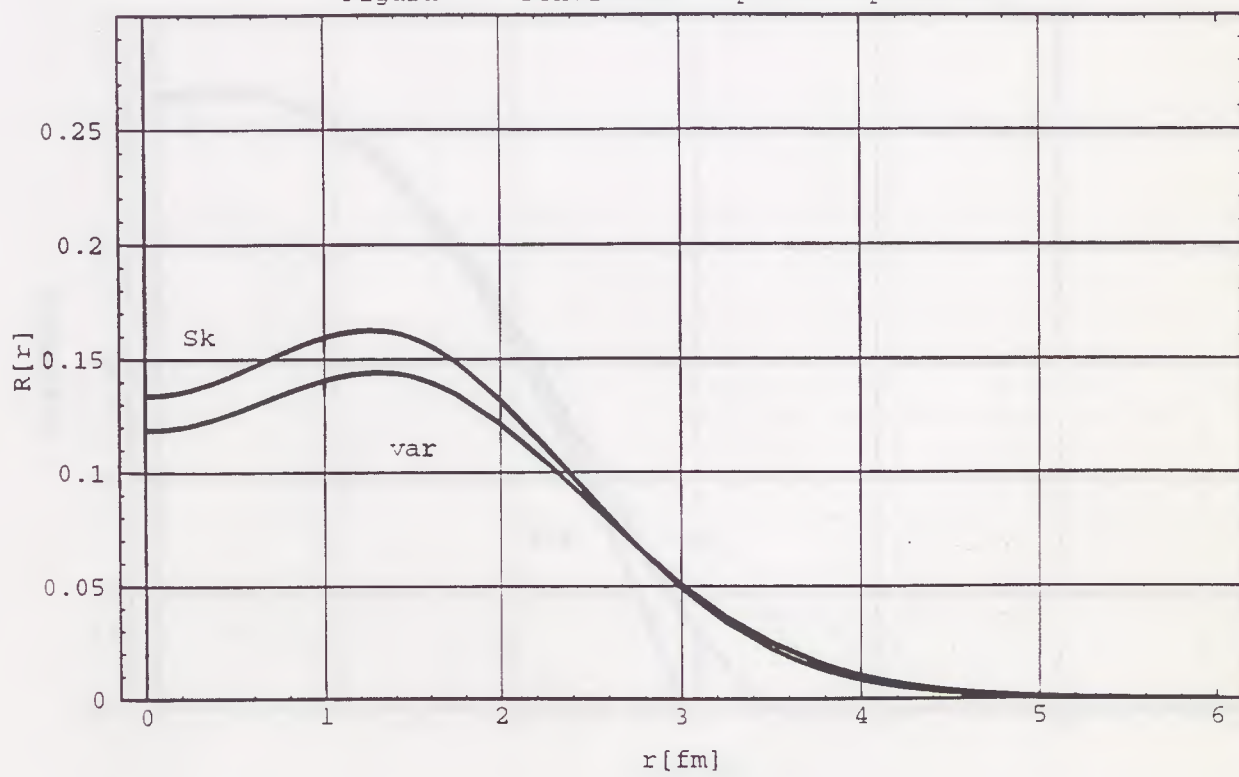
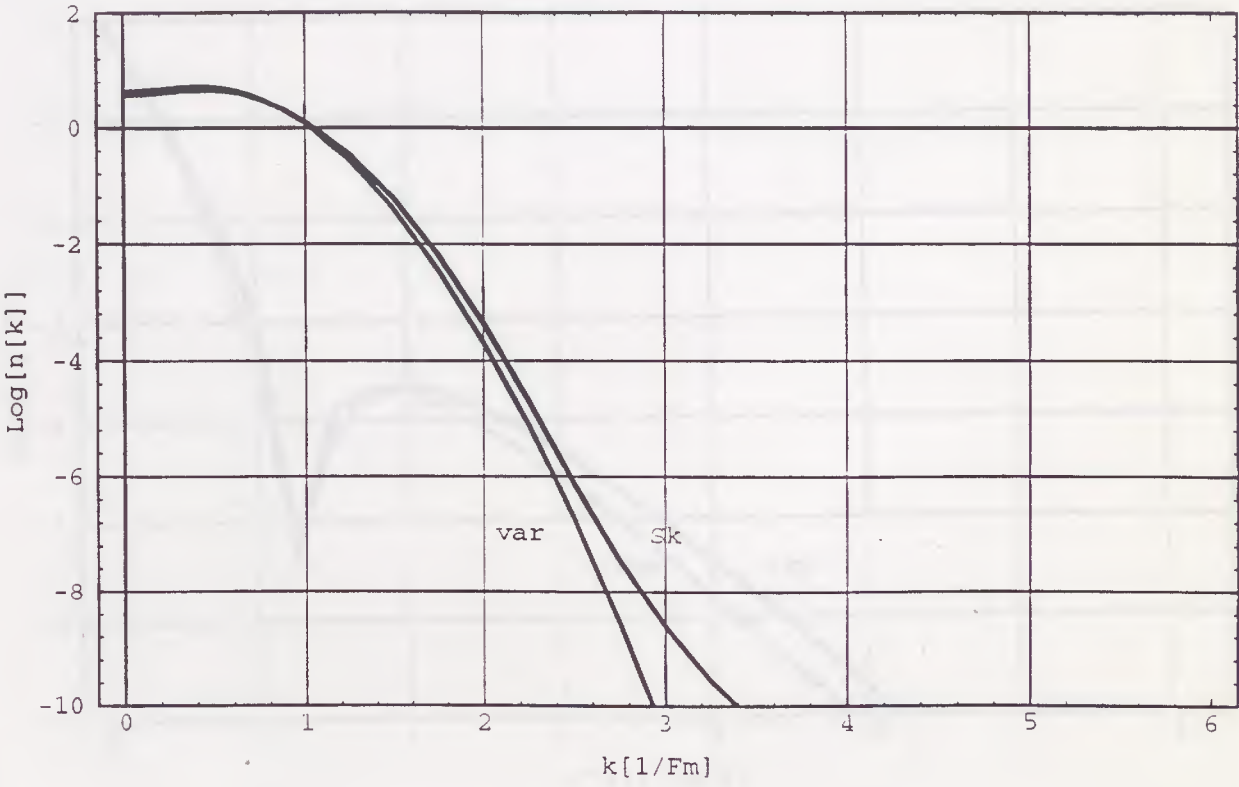
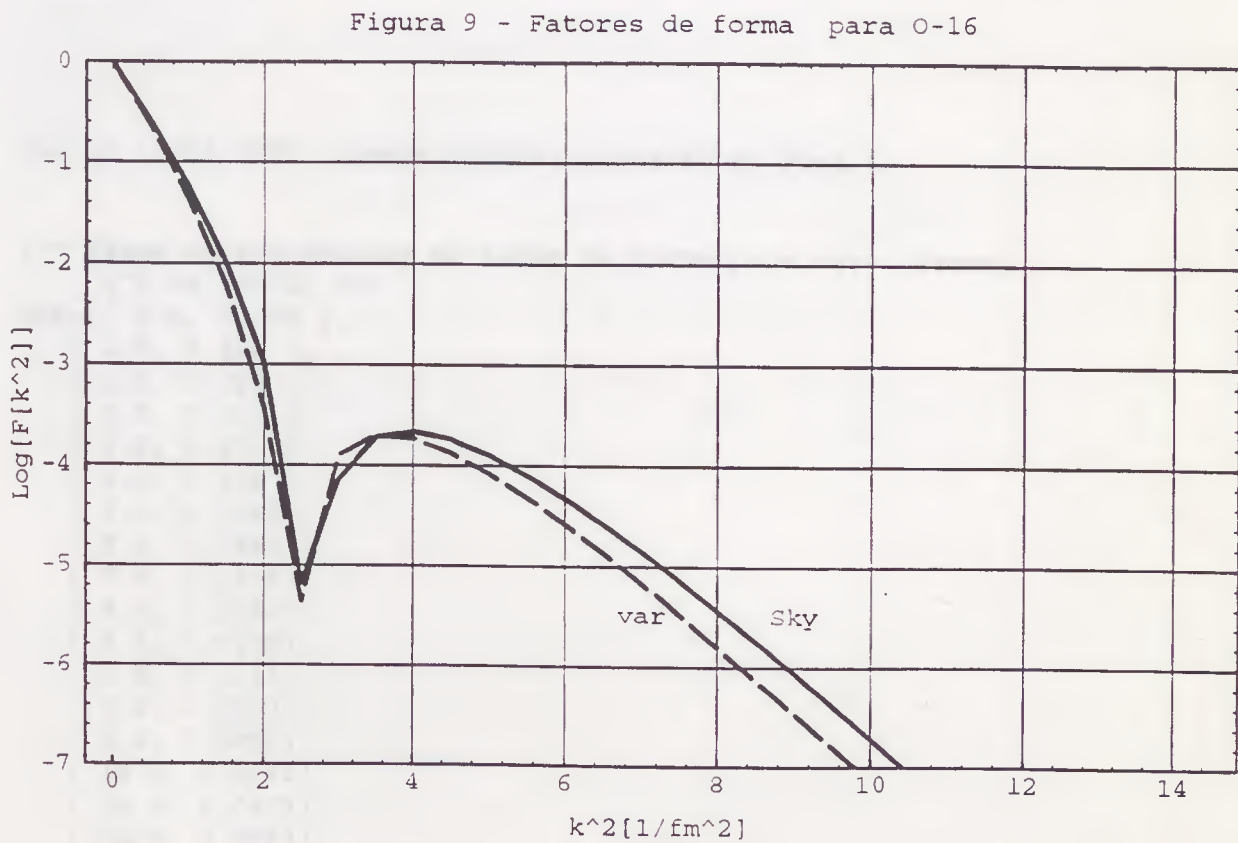


Figura 8 - Distribuição de momentos para O-16





6.1.6 Programas

Listado dos programas em Mathematica usados para realizar os cálculos e gerar figuras.

Jan 13 16:53 1997 oberon:/users/carlos/fr.ma Page 1

```
(** datos experimentales de fator de forma para He-4 (frosh)
   q^2 vs F[q^2] **)
dat={{ 0.5, 0.796 },
      { 1.0, 0.626 },
      { 1.5, 0.494 },
      { 2.0, 0.391 },
      { 3.0, 0.225 },
      { 4.0, 0.159 },
      { 5.0, 0.0965},
      { 6.0, 0.0595},
      { 7.0, 0.0319},
      { 8.0, 0.0184},
      { 8.1, 0.0175},
      { 8.5, 0.0118},
      { 9.0, 0.0069},
      { 9.5, 0.0055},
      { 10.0, 0.0031},
      { 10.5, 0.0023},
      { 11.0, 0.0043},
      { 12.0, 0.0078},
      { 13.5, 0.0094},
      { 15.0, 0.0089},
      { 16.0, 0.0098},
      { 18.0, 0.0082},
      { 20.0, 0.0070}};
Do[dat[[i,2]]=Log[dat[[i,2]]],{i,23}];
dat=Take[dat,20];
f0=ListPlot[dat,Prolog->AbsolutePointSize[5],
  PlotRange->{-10,0},Axes->False,Frame->True,
  GridLines->Automatic,FrameLabel->{"k^2 [1/fm^2]",
    "Log[F[k^2]]"," "," "}]
;
```

Jan 13 16:56 1997 oberon:/users/carlos/var.ma Page 1

```
(** calcula distribuicao de momentos e densidade espacial para
    nucleos duplamente magicos com o metodo variacional**)
<<Graphics'Graphics'
AA=4;nmax=AA/4;
hc=197.327053;mc2=(938.27231+939.56563)/2;
hw=41/AA^(1/3);
amin=N[(mc2*41)^(1/2)/(hc*AA^(1/6))];
c0[n0_,l0_] := Sqrt[2*(Gamma[n0+1])/Gamma[n0+l0+3/2]];
R[n0_,l0_,m0_,a0_,rr_] := c0[n0,l0]*a0^(3/2)*Exp[-((rr*a0)^2)/2]*
    (rr*a0)^(l0)*LaguerreL[n0,l0+1/2,(a0*rr)^2];

nlm={{0,0,0},{0,1,-1},{0,1,0},{0,1,1},{1,0,0},
    {0,2,-2},{0,2,-1},{0,2,0},{0,2,1},{0,2,2}};

rhoam[r_,aa_] := 4*N[Simplify[Sum[R[nlm[[i,1]],nlm[[i,2]],
    nlm[[i,3]],aa,r]^2,{i,1,nmax}]/(4*Pi)];
Plot[rhoam[r,alfask],{r,0.0001,6},
    PlotRange->{0.0,0.3},
    Frame->True,
    GridLines->Automatic,
    Axes->True,
    FrameLabel->{"r[fm]","R[r]",""},
    {" "}],
    Plot[Log[rhoam[k,1/alfask]]/Log[10],{k,0.0001,6},
    PlotRange->{-10,2.0},
    Frame->True,
    GridLines->Automatic,
    Axes->True,
    FrameLabel->{"k[1/Fm]","Log[n[k]]",
    {" "}],
    ww=Table[{q,Log[Abs[NIntegrate[(Sin[Sqrt[q]*r]/Sqrt[q])*
    r*rhoam[r,alfask]*Pi*4/AA,{r,0.0001,6},
    PrecisionGoal->10^(-10)]]]},
    {q,0.00001,15,0.5}];
p1=ListPlot[ww,PlotRange->{-7,0},Axes->False,Frame->True,
    PlotJoined->True,
    GridLines->Automatic,FrameLabel->{"k^2[1/fm^2]",
    "Log[F[k^2]]"," "," "},
    ];

alfa=N[(mc2*41)^(1/2)/(hc)];
1/A^(1/6)
```

```

(** calcula densidade espacial e distribuicao de momentos para He-4
    usando metodo GCM com interacao de Gogny **)
a=93.52;
u1=0.7; W1=-402.4; M1=-23.56;
u2=1.2; W2=-21.30; M2=-68.81;
d=0.722008*1350*6/16;
x10=-2;
x20=0.0;
T=6;AA=4;
nmax=1;
n=20;
x[i_]:=x10+(x20-x10)*(i-1)/n;
som[i_,j_]:= (x[i]+x[j])/2.;
dif[i_,j_]:=x[i]-x[j];

overx=Table[N[Sech[dif[i,j]]^T],{i,n+1},{j,n+1}];
kernx=Table[N[overx[[i,j]]*
  (a*Sech[dif[i,j]]*Exp[2.*som[i,j]]+
  6*(W1+M1)*u1^3/(u1^2+2*Sech[dif[i,j]]*Exp[-2.*som[i,j]])^(3/2)+
  6*(W2+M2)*u2^3/(u2^2+2*Sech[dif[i,j]]*Exp[-2.*som[i,j]])^(3/2)+
  d*Cosh[dif[i,j]]^2*Exp[2*2*som[i,j]])],
  {i,n+1},{j,n+1}];
diag=Table[kernx[[i,i]],{i,n+1}];
imin=Position[diag,Min[diag]][[1,1]];
alfago=Exp[x[imin]];
k=Eigenvalues[N[overx]];
k1=Cases[k,x_/;x>10^(-10)];
l=Length[k1];

ukx=Eigenvectors[N[overx]];
ukx1=Take[ukx,1];
k2=1/Sqrt[k1];

skq=DiagonalMatrix[k2];
vkx=skq.ukx1;

kk=vkx.kernx.Transpose[vkx];
ok=vkx.overx.Transpose[vkx];

e=Eigenvalues[kk];
gk=Eigenvectors[kk];

```



```

em=Position[e,Min[e]][[1,1]];
fg=Transpose[vkx].gk[[em]];
(*ListPlot[fg,PlotJoined->True,Frame->True,PlotLabel->"Figura 3 -
funcao peso GCM com Gogny"
,FrameLabel->{"x","f(x)","",""}]*)
mg=Table[overx[[i,j]]*rhoam[r,Sqrt[(Exp[2*x[i]]+
Exp[2*x[j]])/2] ],
{i,n+1},{j,n+1}];
mkg=Table[overx[[i,j]]*rhoam[r,Sqrt[(Exp[-2*x[i]]+
Exp[-2*x[j]])/2] ],
{i,n+1},{j,n+1}];

Plot[fg.mg.fg,{r,0.0001,6},PlotRange->{0.0,0.4},
Frame->True,
GridLines->Automatic,
Axes->True,
FrameLabel->{"r[fm]","n(r)",
" "," "},

PlotStyle->Dashing[{0.03,0.01}]];
Plot[Log[fg.mkg.fg]/Log[10],{r,0.0001,6},
Frame->True,
PlotRange->{-10,2.0},
GridLines->Automatic,
Axes->True,
FrameLabel->{"k[1/fm]","Log[n(k)]",
" "," "},
PlotStyle->Dashing[{0.03,0.01}]];
wg=Table[{q,Log[Abs[NIntegrate[Sin[Sqrt[q]*r]/Sqrt[q]*
r*fg.mg.fg*Pi,{r,0.0001,6},
PrecisionGoal->10^(-10)]]]},
{q,0.00001,15,0.5}];

p3=ListPlot[wg,PlotRange->{-10,0},Axes->False,Frame->True,
PlotJoined->True,PlotStyle->Dashing[{0.03,0.01}],
GridLines->Automatic,FrameLabel->{"k^2[1/fm^2]",
"Log[F[k^2]]"," "," "}]

```

```
(** calcula densidade espacial e distribuicao de momentos para
   He-4, O-16 e Ca-40 usando o metodo GCM com interacao de Skyrme **)
i=1;j=3;
```

```
(***Parametros de Skyrme***)
```

```
t={ {-1057.3, 235.9, -100, 14463.5, 0.56, 120.0},
     {-1169.9, 586.6, -27.1, 9331.1, 0.34, 105.0},
     {-1128.75, 395.0, -95.0, 14000.0, 0.45, 120.0},
     {-1205.6, 765.0, 35.0, 5000.0, 0.05, 150.0},
     {-1248.29, 970.56, 107.22, 0.0, -0.17, 150.0},
     {-1111.81, 271.67, -138.33, 17000.0, 0.583, 115.0}};
```

-2646, 410, -135, 15595, 0.09

```
C1={ 3, 18, 60 };
```

```
D0={ 4, 31, 1945/16 };
```

```
G0={ 12, 57, 2595/16 };
```

```
H0={ 6, 249/2, 23715/32 };
```

```
F0={ 1, 116/9, 2060/27 };
```

```
E0={ -27, -139, -401 };
```

```
A= { 4, 16, 40 };
```

```
T= { 6, 36, 120 };
```

```
hc=197.327;mc2=939;
```

```
hw=41/A[[i]]^(1/3);
```

```
a0=N[(mc2*41)^(1/2)/(hc*A[[i]]^(1/6))];
```

```
a=hc^2/(2*mc2)*2*C1[[i]]*(A[[i]]-1)/A[[i]];
```

```
b=N[3/2*t[[j,1]]*D0[[i]]/(2*Pi)^(3/2)];
```

```
c=N[(3*t[[j,2]]+5*t[[j,3]])*H0[[i]]/(8*(2*Pi)^(3/2))+
     (9*t[[j,2]]-5*t[[j,3]])*G0[[i]]/(16*(2*Pi)^(3/2))];
```

```
d=N[4*F0[[i]]*t[[j,4]]/(Pi*Sqrt[3])^3];
```

```
x10=-2.0;
```

```
x20=0.0;
```

```
TT=T[[i]];AA=A[[i]];
```

```
nmax=A[[i]]/4;
```

```
n=20;
```

```
x[i_]:=x10+(x20-x10)*(i-1)/n;
```

```
som[i_,j_]:= (x[i]+x[j])/2.;
```

```
dif[i_,j_]:=x[i]-x[j];
```

→ 27, 19599
S₀ F₀ = 1.62927251

```

overx=Table[N[Sech[dif[i,j]]^TT],{i,n+1},{j,n+1}];
kernx=Table[N[overx[[i,j]]*
(a*Sech[dif[i,j]]*Exp[2.*som[i,j]]+
b*Cosh[dif[i,j]]^(3./2.)*Exp[3.*som[i,j]]+
c*Cosh[dif[i,j]]^(5./2.)*Exp[5.*som[i,j]]+
d*Cosh[dif[i,j]]^3.*Exp[6.*som[i,j]])],
{i,n+1},{j,n+1}];
diag=Table[kernx[[i,i]],{i,n+1}];
imin=Position[diag,Min[diag]][[1,1]];
alfask=Exp[x[imin]];
k=Eigenvalues[N[overx]];
k1=Cases[k,x_/;x>10^(-10)];
l=Length[k1];
(*k1=Take[k,n+1];**)

ukx=Eigenvectors[N[overx]];
ukx1=Take[ukx,1];
k2=1/Sqrt[k1];

skq=DiagonalMatrix[k2];
vkx=skq.ukx1;

kk=vkx.kernx.Transpose[vkx];
ok=vkx.overx.Transpose[vkx];

e=Eigenvalues[kk];

gk=Eigenvectors[kk];

em=Position[e,Min[e]][[1,1]];
fs=Transpose[vkx].gk[[em]];
(*ListPlot[fs,PlotJoined->True,Frame->True,PlotLabel->"Figura 2 -
funcao peso GCM com Skyrme III"
,FrameLabel->{"x","f(x)","",""}]*)
ms=Table[overx[[i,j]]*rhoam[r,Sqrt[(Exp[2*x[i]]+
Exp[2*x[j]])/2]],
{i,n+1},{j,n+1}];
mks=Table[overx[[i,j]]*rhoam[r,Sqrt[(Exp[-2*x[i]]+
Exp[-2*x[j]])/2]],
{i,n+1},{j,n+1}];

```

```

Plot[fs.ms.fs,{r,0.0001,6},
  PlotRange->{0.0,0.4},
  Frame->True,
  GridLines->Automatic,
  Axes->True,
  FrameLabel->{"r[fm]","R(r)",
    " "," "}],
Plot[Log[fs.mks.fs]/Log[10],{r,0.0001,6},
  Frame->True,
  GridLines->Automatic,
  Axes->True,
  PlotRange->{-10,2.0},
  FrameLabel->{"k[1/fm]","Log[n(k)]",
    " "," "}],
ws=Table[{q,Log[Abs[NIntegrate[Sin[Sqrt[q]*r]/Sqrt[q]*
  r*fs.ms.fs*Pi*4/AA,{r,0.0001,6},
  PrecisionGoal->10^(-10)]]]},
  {q,0.00001,15,0.5}],
p2=ListPlot[ws,PlotRange->{-7,0},Axes->False,Frame->True,PlotJoined->True,
  GridLines->Automatic,FrameLabel->{"k^2[1/fm^2]",
    "Log[F[k^2]]"," "," "}]
]

```

Bibliografia

- [1] P.Ring and P.Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem*. Springer-Verlag 1993
- [2] J.W.Negele, Phys. Rev. **C1**, 1260(1970)
- [3] J.J.Griffin, Phys. Rev. **108**, 328(1957)
- [4] A.F.R. de Toledo Piza and E.J.V. de Passos, Phys. Rev. **C15**, 1477(1977)
- [5] T.H.R.Skyrme, Nuc. Phys. **9**, 615(1959)
- [6] D.Vautherin and D.M.Brink. Phys. Rev. **C5**, 626(1972)
- [7] A.N.Antonov. P.E.Hogdson and I. Zh. Petkov. *Nucleon Correlation in Nuclei*. Springer-Verlag 1973
- [8] J.Dechargé and D.Gogny, Phys. Rev. **C21**, 1568(1980)
- [9] K.L.G.Heyde. *The Nuclear Shell Model*. Springer-Verlag 1993
- [10] D.M.Brink, Proc. Int. School of Physics "E. Fermi". Course **36**, ed. C. Bloch. (Academic Press, New York (1966)
- [11] H. Flocard and D.Vautherin, Nuc. Phys. **A264**, 197(1976)
- [12] D.L.Hill and J.A.Wheeler. Phys. Rev. **89**, 1102(1953)
- [13] J.J.Griffin and J.A.Wheeler. Phys. Rev. **108**, 311(1957)

-
- [14] J.W.Negele and D.Vautherin, Phys. Rev. **C5**, 1472(1972)
 - [15] I.Sick, Phys. Lett. **B53**, 15(1974)
 - [16] M.Beitner, H.Flocard, N. Van Giai and P.Quentin, Nuc. Phys. **A238**, 29(1975)
 - [17] H.Flocard and D.Vautherin, Phys. Lett. **B55**, 259(1975)
 - [18] K.F.Liu and G.E.Brown, Nucl. Phys. **A265**, 385(1976)
 - [19] D.Galetti and A.F.R. de Toledo Piza, Phys. Rev. **C17**, 774(1978) *✓*
 - [20] A.F.R. de Toledo Piza and E.J.V. de Passos, Nuovo Cimento **B45**, 1(1978)
 - [21] M.Waroquier et al, Phys. Rev. **C19**, 1983(1979)
 - [22] J.W.Negele, Physics Today, April 1985
 - [23] A.N.Antonov and Chr.V.Christov, Nuovo Cimento **A91**, 119(1986)
 - [24] A.N.Antonov and I.S.Bonev, Nuovo Cimento **A100**, 779(1988)
 - [25] I. Sick and J.S. McCarthy, Nucl. Phys. **A150**, 631(1970)
 - [26] J.S. McCarthy, I. Sick and R.R. Whitney, Phys. Rev. **C15**, 1396(1977)
 - [27] R.N. Frosh, J.S. McCarthy, R.E. Rand, and M.R. Yearian, Phys. Rev. **160**, 874(1967)
 - [28] C. W. Wong, Phys. Rep.**15**, 283(1975)

