





Instituto de Física Teórica
Universidade Estadual Paulista

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

IFT-D.005/93

O Princípio Variacional de Kohn Complexo para
Solução da Equação de Lippmann-Schwinger com
potencial tensorial

Carlos Fernando de Araujo Jr.

Orientadores

Lauro Tomio

Sadhan K. Adhikari



Setembro 1993

IFT/TE
M-101

EXERCÍCIOS

1. O Brasil é um país desenvolvido e apresenta elevado grau de industrialização, assim como elevado nível de renda e desenvolvimento econômico.

2. O Brasil possui uma grande diversidade cultural e é considerado um país multicultural e pluricultural.

3. O Brasil é um país tropical, com clima quente e úmido, predominando as florestas tropicais e o cerrado.

4. O Brasil é um país de dimensões continentais, com uma grande extensão territorial e uma população de aproximadamente 200 milhões de habitantes.

5. O Brasil é um país de grande diversidade étnica e cultural, com uma grande mistura de povos e culturas.

À minha mãe, Simone e Nilza.

Agradecimentos

Agradeço ao Lauro, orientador e amigo, que através de sua constante paciência garantiu a evolução passo a passo desse trabalho.

Agradeço também ao Professor Adhikari pela sua orientação neste trabalho e por suas observações e sugestões sempre incisivas.

Ao Professor Gerhard Wilhelm Bund sou-lhe grato pela orientação no primeiro ano do mestrado.

Agradeço a todos os amigos e funcionários do IFT que tornaram possível a execução deste trabalho.

Ao apoio financeiro do CNPq.

Resumo

O princípio variacional de Kohn complexo, muito usado em física atômica, é aplicado neste trabalho para o problema nucleon-nucleon, na obtenção da solução da equação de Lippmann-Schwinger. O método é aplicado para o estudo do espalhamento nucleon-nucleon em ondas parciais desacopladas $l \geq 0$ e para as ondas parciais acopladas ${}^3S_1 - {}^3D_1$, utilizando-se o potencial realístico de Reid-Pieper. O método foi estendido para a obtenção de funções de onda e estados de energia negativa na presença da força tensorial; a energia de ligação do dêuteron encontrada, para o mesmo potencial, foi $E_B = 2.2298 \text{ MeV}$. Calculamos também a razão assintótica entre os estados D e S da função de onda do dêuteron, $\eta_D = 0.02634$. Com os resultados obtidos nós sugerimos que esse método deve ser conveniente para o tratamento do problema de três nucleons.

Palavras-Chaves [matriz-T, variacional, Kohn, Reid]

Áreas de Conhecimento: [1.05.04.03-6, 1.05.01.01-0]

Abstract

The complex Kohn variational principle, frequently used in atomic physics, is applied in this work to the two-nucleon problem, to obtain the solution of the Lippmann-Schwinger equation. The method is applied to study nucleon-nucleon scattering in uncoupled partial $l \geq 0$ waves, and also in coupled waves ${}^3S_1 - {}^3D_1$, using the phenomenological Reid-Pieper potential. The method was also extended to obtain the wave function and negative-energy solutions in the presence of tensor force; the binding energy found for the deuteron, for the same potential, was $E_B = 2.2298 \text{ MeV}$. We also calculated the asymptotic D state to S state ratio for the deuteron wave function, $\eta_D = 0.02634$. With the present results we suggest that the method must be suitable for studying the three nucleon problem.

Key-Words [T-matrix, Variational, Kohn, Reid]

Índice

1	Introdução	3
2	Métodos Variacionais	12
2.1	Introdução	12
2.2	Operadores de Ordem Finita	13
2.3	Expressões Variacionais	19
3	O Princípio Variacional de Kohn Complexo em Canais Desacoplados	24
3.1	Introdução	24
3.2	O Princípio Variacional de Kohn Complexo	25
3.3	Decomposição em Ondas Parciais I	29
3.4	Cálculo dos Elementos de Matriz	33
3.5	Resultados	37
4	O Princípio Variacional de Kohn Complexo em Canais Acoplados	46
4.1	Introdução	46
4.2	Decomposição em Ondas Parciais II	47
4.3	Cálculo dos Elementos de Matriz	51
4.4	Estado Ligado	54
4.5	Resultados	55
4.6	Resumo e Conclusão	57
5	Conclusão Final	67

A Definição das funções $P_l(z)$ e $Q_l(z)$	69
Relação das Figuras	70
Relação das Tabelas	71
Referências Bibliográficas	72

Introdução

Capítulo 1

Introdução

Muito se tem estudado, do ponto de vista teórico e prático, sobre métodos para a solução de equações integrais de espalhamento de dois ou mais corpos. Dada a complexidade que esses processos podem alcançar, métodos eficientes e seguros para a solução dessas equações são sempre motivo de interesse. Vários são os métodos de solução das integrais de espalhamento e alguns serão discutidos neste trabalho. O método variacional, tradicionalmente usado para a solução da equação de Schrödinger, tem se destacado também na solução das equações de espalhamento em física atômica e nuclear. De fato, os princípios variacionais têm sido uma importante alternativa de cálculo para problemas em mecânica quântica. Na verdade, em problemas de estados-ligados ele já fora utilizado por Schrödinger em seus artigos iniciais em mecânica quântica. Nas décadas de quarenta a cinquenta várias formulações variacionais surgiram em teoria de espalhamento. A primeira aplicação dos princípios variacionais em teoria de espalhamento se deve a Hulthén[2]. Em 1948, W. Kohn[3] desenvolveu um princípio variacional para o espalhamento de dois corpos baseado na equação diferencial de Schrödinger. Outras formulações se devem a Huang[4] e Feshbach e Rubinov[5].

Baseado numa outra abordagem para os problemas de espalhamento, Schwinger[6](1947) em seu artigo intitulado “Um Método Variacional para Problemas em Espalhamento”, tratou o espalhamento através de uma equação integral, que mais tarde ficaria conhecida como

equação de Lippmann-Schwinger. Nesse trabalho é proposto um princípio variacional para essa equação integral. Algumas dificuldades de implementação, em alguns problemas de espalhamento, do método de Hulthén levou a comunidade a utilizar o método de Kohn em detrimento do método de Schwinger que possui a “desagradável” característica de envolver a função de Green no cálculo dos elementos de matriz.

Com a utilização do princípio variacional de Kohn para obtenção de resultados mais quantitativos, em processos de espalhamento elétron-Hidrogênio, observou-se certas anomalias devido a singularidades espúrias ou pseudo-ressonâncias[7]. Vários trabalhos dedicados a elucidação desse problema surgiram juntamente com outros métodos de solução das equações de espalhamento. Nesbet e colaboradores[8] desenvolveram várias formulações para se evitar o problema das singularidades anômalas no princípio variacional de Kohn. Apesar de resolverem o problema das singularidades essas formulações não apresentavam o resultado esperado para problemas conhecidos. Contudo, a partir da constatação de que aplicando-se certas condições de contorno nas funções variacionais as singularidades podiam ser deslocadas para diferentes energias outras formulações foram desenvolvidas. Recentemente foi sugerido com base nessa idéia um método para o princípio variacional de Kohn que utiliza funções de variável complexa para se obter o comportamento assintótico. Algumas aplicações do método para potenciais exponenciais, atrativos e repulsivos, tem sugerido uma convergência superior a outros métodos variacionais. Acreditava-se que esse princípio variacional estivesse livre de singularidades. Contudo, foi observado por Lucchese[9] e Adhikari[10] que singularidades poderiam ocorrer em algumas situações especiais, mas não tornariam o método ineficiente. Com o incremento das atividades experimentais nos últimos vinte anos em processos de fotoionização, colisões elétron-átomo e elétron-molécula; tornou-se necessário o estudo teórico e de técnicas numéricas para a descrição e entendimento quantitativo desses processos de colisão. Deste modo, os princípios variacionais foram revitalizados. Também em física nuclear os princípios variacionais têm sido usados como uma alternativa eficiente no cálculo de deslocamentos de fase do espalhamento NN , utilizando-se potenciais semi-fenomenológicos.

Neste trabalho temos como principal objetivo apresentarmos o princípio variacional de Kohn complexo com uma alternativa para o cálculo de quantidades de interesse em espalhamento para problemas de poucos corpos em física Nuclear utilizando-se potenciais de dois corpos realísticos. Para esse propósito aplicamos o princípio variacional de Kohn complexo na solução da equação de Lippmann-Schwinger para o problema de dois nucleons utilizando potenciais fenomenológicos nas ondas parciais $l = 0, 1, 2$ e para um potencial realístico, contendo interação tensorial e spin-órbita.

Adiantamos aqui aspectos gerais do formalismo que iremos utilizar, discutindo aspectos gerais da interação NN .

Daremos aqui uma rápida e incompleta, revisão dos principais resultados da teoria de espalhamento. Abordaremos essencialmente o espalhamento elástico, onde o estado interno das partículas que colidem não se altera. No espalhamento quântico estacionário a descrição do processo de espalhamento é a de que á grandes distâncias do centro espalhador a função de onda do processo, no referencial de centro de massa, se constitui da superposição de uma onda incidente e uma onda espalhada. Nesse referencial o problema de espalhamento de duas partículas se reduz ao espalhamento de uma partícula, de massa reduzida m , por um centro de força onde atua o potencial V . Assim, a grandes distâncias do centro espalhador temos

$$|\psi\rangle = |\phi_{inc}\rangle + |\phi_{esp}\rangle \quad (1.1)$$

onde $|\phi_{inc}\rangle$ e $|\phi_{esp}\rangle$ se referem a função de onda incidente e espalhada, respectivamente. A dinâmica do processo é descrita pela equação diferencial de Schrödinger

$$(E - H_0)|\psi\rangle = V|\psi\rangle \quad (1.2)$$

onde $H_0 = \vec{p}^2/2m$ e V o potencial de interação. Notando que para problemas em espalhamento $E > 0$ e portanto a equação tem espectro contínuo.

Podemos tratar o problema do espalhamento acima formulado através da equação diferencial acima ou ainda de uma outra forma; através de uma equação integral. Do ponto de

vista formal a maneira de se transformar uma equação diferencial em uma equação integral é via formalismo das funções de Green[11], onde a função de Green é solução da equação

$$(E - H_0)|G_0\rangle = \frac{\hbar^2}{2m}\delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1.3)$$

e podemos escrever então que

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = |\phi\rangle + G_0^\pm V|\psi^{(\pm)}\rangle \quad (1.4)$$

onde $G_0^\pm = \lim_{\epsilon \rightarrow 0}(E - H_0 \pm i\epsilon)^{-1}$ é a função de Green para a partícula livre. A quantidade “ $i\epsilon$ ” se deve á natureza singular de $(E - H_0)^{-1}$ em problemas de espalhamento $E > 0$ e o “ \pm ” tem o importante papel de nos dar as condições de contorno do problema.

Antes de prosseguirmos estudaremos um pouco o comportamento assintótico da Eq.(1.4). Na representação das coordenadas temos

$$\langle \vec{r} | \psi^+ \rangle = \langle \vec{r} | \phi_{inc} \rangle + \int d\vec{r}' \langle \vec{r} | G_0^+ | \vec{r}' \rangle V(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \psi^+ \rangle d\vec{r}' \quad (1.5)$$

ou, explicitamente,

$$\langle \vec{r} | \psi^+ \rangle = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} - \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\vec{r}' \frac{e^{ik|\vec{r}-\vec{r}'|}}{|\vec{r}-\vec{r}'|} V(\vec{r}') \langle \vec{r}' | \psi^+ \rangle. \quad (1.6)$$

Quando $r \rightarrow 0$, nós temos que

$$|\vec{r} - \vec{r}'| \xrightarrow{r \rightarrow \infty} r - \vec{r}' \cdot \vec{n} + O\left(\frac{r'}{r}\right),$$

e então o comportamento assintótico de G_0

$$\langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \times e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'}, \quad (1.7)$$

onde $\vec{k} \equiv \vec{r}/r$. Assim podemos escrever a equação (1.6) tal que

$$\langle \vec{r} | \psi^{(+)} \rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + \frac{e^{ikr}}{r} \times f(\theta, \phi). \quad (1.8)$$

Se o potencial $V(\vec{r}')$ tiver simetria esférica, então

$$f(\theta, \phi) = f(\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \langle k | V | \psi^+ \rangle \quad (1.9)$$

a equação acima, Eq.(1.9) está diretamente relacionada com matriz- T e com $\delta_l(k)$ que é o deslocamento de fase. Essa quantidade é de grande interesse experimental e teórico, já que ela pode ser determinada experimentalmente. Toda informação sobre o processo de espalhamento pode ser tirada da Eq.(1.6). Contudo, outras abordagens também são usadas tendo em vista sua aplicação em problemas de espalhamento mais complexos. Uma dessas abordagens é através da matriz de transição T . A definição da matriz- T é dada por

$$T|\vec{p}\rangle = V|\psi^{(+)}\rangle \quad (1.10)$$

onde $|\vec{p}\rangle$ é o momento inicial e $|\psi^{(+)}\rangle$ é a solução da Eq.(1.6). Com a definição para a matriz- T acima podemos escrever a equação de Lippmann-Schwinger na forma operatorial

$$\begin{aligned} T &= V + TG_0V \\ &= V + VG_0T \end{aligned} \quad (1.11)$$

ou em outra forma, pelo uso da identidade

$$G = G_0 + G_0VG,$$

tal que

$$T = V + VGV. \quad (1.12)$$

A formulação do problema do espalhamento via matriz- T elimina o uso direto da função de onda. A matriz- T contém, por definição, o comportamento assintótico da função de onda se conectando diretamente com a observável física do deslocamento de fase, Eq.(1.9). Deste modo ela se torna conveniente para tratarmos o problema de espalhamento envolvendo várias partículas. Outras possibilidades de se estudar o espalhamento NN é através da matriz- S . Essa matriz se relaciona com a matriz- T pela relação

$$S_l = 1 - 2ikT_l. \quad (1.13)$$

A matriz- S é proporcional a amplitude de espalhamento e é normalmente introduzida através do operador de deslocamento temporal que não será visto aqui, para maiores detalhes ver Ref.[12].

Outra possibilidade que deve ser mencionada é o tratamento do problema do espalhamento via matriz- K . Essa matriz é definida tomando-se apenas o valor principal da função de Green, G_0^P , tal que

$$K = V + VG_0^P K \quad (1.14)$$

Existe uma considerável vantagem, de ordem computacional, na utilização da matriz- K , pois como a matriz- K conduz a matrizes simétricas e reais ela pode reduzir o tempo computacional em problemas complexos.

O que diremos a respeito da solução da equação de Lippmann-Schwinger ?

Há vários métodos de solução de uma equação integral tipo Lippmann-Schwinger. O método mais “básico” seria encontrar a solução através do método iterativo que resulta na série de Born. Deste modo, a solução iterativa da Eq.(1.11) fica

$$T = V + VG_0V + VG_0VG_0V + \dots \quad (1.15)$$

e é sabido que sempre podemos escrever a Eq.(1.15) na forma iterativa, Eq.(3.58). Contudo, existe um sério problema: a série de Born nem sempre converge!

Do ponto de vista matemático podemos formular o problema de resolver uma equação integral do tipo Lippmann-Schwinger num espaço normado; espaço de Banach. Nesse espaço podemos atribuir uma norma a um operador; no caso em específico o núcleo da equação integral ou “kernel” G_0V . Definindo a norma de um operador, um kernel genérico k , como sendo o menor número M que satisfaz

$$\|kf\| \leq M\|f\|, \quad (1.16)$$

para toda função f pertencente a um espaço de Banach, $\|k\|$ será identificado como a norma do kernel k .

Deste modo, resolver uma equação integral

$$\begin{aligned} f &= g + kf, \\ &= g(1 - k)^{-1}, \end{aligned} \quad (1.17)$$

para um operador k , tal que $\|k\| < 1$; podemos pensar de uma maneira análoga ao que fazemos com a expressão $(1 - x)^{-1}$ quando $x < 1$; assim, expandindo a Eq.(1.17) temos

$$f = g + kg + k^2g + k^3g + \dots, \quad (1.18)$$

podemos dizer que a série de Born acima converge se $\|k\| < 1$. Contudo quando $\|k\| \geq 1$ não podemos assegurar se a série converge ou não. Portanto, a condição que encontramos é apenas suficiente mas não necessária. Isso é uma dificuldade séria porque kernels com a característica acima, $\|k\| \geq 1$, são relativamente comuns em física; o potencial de Yukawa[13], por exemplo, resulta em uma série de Born divergente. Na verdade, sabemos que quando o potencial é atrativo o suficiente para ter um estado ligado a série de Born não converge facilmente.

Foi Weinberg[14] quem colocou critérios mais claros sobre a convergência da série de Born. Assim ele estabeleceu que a divergência dessa série, quando ocorre, está associada a pelo menos um autovalor do kernel maior que um. A maneira de Weinberg de resolver o problema foi através do chamado método da “quasi-partícula”. Neste método procura-se construir uma interação mais fraca que a interação original através da informação que se tem da autofunção do kernel da equação integral de espalhamento original. Isso dá origem a uma equação auxiliar que garante a convergência da série final. Nesse método temos o duplo trabalho de calcularmos os respectivos autovalores e autofunções do kernel da equação original, além de resolvermos as equações auxiliares correspondentes. Seguindo a idéia geral de Weinberg outros métodos iterativos via equações auxiliares foram formulados, com o objetivo de tornar o kernel da equação mais fraco, e de modo a simplificar a solução numérica. A principal característica desses métodos, que necessitam de um envolvimento computacional superior aos métodos variacionais, é que os resultados obtidos são numericamente bastante precisos[16].

No problema envolvendo dois nucleons, a matriz- T na camada de energia (“on-shell”) relaciona-se diretamente com os deslocamentos de fase dado pela Eq.(1.9). Há vários po-

tenciais para a interação NN que apresentam o mesmo deslocamento de fase. Isto é um problema intrínseco: a interação NN não pode ser unicamente determinada pelo espalhamento de duas partículas! Assim neste tipo de espalhamento os elementos da matriz- T fora da camada de energia (“off-shell”); $\langle \vec{k}' | T(E_k) | \vec{k} \rangle$ não têm grande importância, pois estamos tratando de espalhamento elástico, $k = k'$. Isto pode ser facilmente entendido já que os potenciais existentes são sempre parametrizados para dar os deslocamentos de fase experimentais. No entanto, quando do espalhamento envolvendo mais de duas partículas esses elementos de matriz fora da camada de energia são importantes. Processos podem ocorrer no espalhamento de duas partículas, na presença de uma terceira partícula. Neste caso, a energia não é conservada, no subsistema de duas partículas, pois uma parte da energia é transferida para a terceira partícula. Nesses processos efeitos “off-shell” tornam-se importantes. Assim, para resolvermos o problema de três nucleons necessitamos dos elementos de matriz- T fora da camada de energia.

Estabelecer um potencial para a interação nucleon-nucleon tem sido um problema de difícil solução que pode bem ser traduzido nas palavras de H.A. Bethe de algum tempo atrás: “in the past quarter century physicist have devoted a huge amount of experimentation and mental labor to the problem – probably more man-hours than have history of mankind”, (Scientific American, Setembro, 1958). Dessa época aos dias de hoje não temos uma solução satisfatória.

Do ponto de vista teórico a interação forte entre os nucleons deve ser descrita pela QCD (“Quantum Chromodynamics”). Apesar de algum sucesso na explicação qualitativa e mesmo quantitativa de alguns fenômenos, a derivação de um potencial via QCD é algo que ainda não se concretizou. Uma descrição quantitativa da interação NN vem da teoria de troca de mesons. Segundo essa teoria cerca de seis bosons desempenham o papel de intermediadores dos diversos tipos de força presentes na interação nucleon-nucleon, por exemplo; o pion π é responsável pela força tensorial que é reduzida à curtas distâncias pelo meson- ρ , a força spin-órbita e repulsão a curtas distâncias é devida ao boson- ω e o meson- σ é responsável pela força de atração na região intermediária.

Do estudo da simetria de um sistema de dois nucleons, tal como o dêuteron, e dos resultados advindos da teoria dos mesons. Okubo e Marshak[17] apresentaram uma forma geral para a interação NN , que para uma interação independente da energia, possui os seguintes termos¹

$$V = V_c + V_{LS} + V_T, \quad (1.19)$$

onde V_c , V_{LS} e V_T , são, respectivamente, as componentes; central, spin-órbita e tensorial. Os potenciais de Reid[22] que iremos utilizar possui todos esses termos. Esses potenciais são divididos em corço mole(“soft-core”) e corço duro(“hard-core”). Cada onda parcial($j \leq 2$) é parametrizada fenomenologicamente em termos de funções tipo Yukawa, e exponenciais divididas por potências de r . A parte de troca de um pion também esta incluída. Em algumas ondas parciais há uma explícita distinção entre as partes central, tensorial e spin-órbita. Os potenciais de corço mole não são regulares na origem, mas comportam-se singularmente com r^{-1} .

Neste presente capítulo apresentamos os aspectos básicos do problema que iremos tratar neste trabalho. Na sequência o trabalho está dividido da seguinte maneira: No capítulo 2 abordamos a conexão entre o método de expansões separáveis e os princípios variacionais de Kohn e Schwinger. Mostraremos, basicamente, que existe uma equivalência entre as expanões separáveis obtidas e as expressões variacionais de Kohn [3] e Schwinger[6]. Nos capítulo 3 e 4 desenvolvemos as equações e aplicamos o formalismo desenvolvido para a solução da equação de espalhamento de Lippmann-Schwinger. No capítulo 3 utilizamos os potenciais fenomenológicos de Reid(“soft-core”) em várias ondas parciais para a obtenção das quantidades de espalhamento. No capítulo 4 tratamos o problema de canais acoplados ${}^3S_1 - {}^3D_1$, onde existe o estado ligado do dêuteron, obtendo também a energia de ligação e função de onda. Apresentamos também a razão assintótica η_D e o parâmetro de mistura ϵ_1 , além dos deslocamentos de fase.

¹Os termos V_c , V_{LS} e V_T que aparecem aqui contêm vários termos dependentes do isospin dos nucleons ou não. Entre os termos mais simples estão $\vec{L} \cdot \vec{S}$ e S_{12} , veja capítulo 4 para definição.

Capítulo 2

Métodos Variacionais

2.1 Introdução

Princípios variacionais podem ser construídos para uma grande variedade de quantidades de interesse; como funções de onda de espalhamento, amplitudes e elementos de matriz em geral [18]. Em física atômica os princípios variacionais têm sido aplicados ao espalhamento elétron-átomo e átomo-molécula, veja ref.[1], com grande sucesso e, em física nuclear tem-se aplicado no espalhamento NN em alguns problemas utilizando potenciais semi-fenomenológicos.

Existe uma grande quantidade de princípios variacionais formulados para tratarem problemas de espalhamento quântico sendo a maioria deles derivados de dois princípios variacionais básicos: princípio variacional de Kohn[3] e o princípio variacional de Schwinger[6]. O princípio variacional de Kohn foi originariamente concebido como um princípio variacional para a equação diferencial de Schrödinger. O princípio variacional de Schwinger foi introduzido através de uma idéia inteiramente diferente do princípio variacional de Kohn, já que foi concebido como um princípio variacional para a equação integral de espalhamento. Essas diferenças peculiares a esses dois princípios variacionais serão exploradas nesse capítulo.

Neste capítulo apresentaremos uma formulação unificada para os princípios variacionais utilizando, para a interação nucleon-nucleon, o método de expansões separáveis [19]. Esse método tem se mostrado útil na solução das equações de espalhamento para dois e três corpos em física nuclear. Bastante conhecido pelos matemáticos desde o início do século, o método de expansões separáveis conduz a uma simplificação nas equações de integrais utilizando-se potenciais separáveis (não locais).

Existe uma interessante conexão entre o método de expansões e os métodos de variacionais de Kohn e Schwinger que serão objetivo deste capítulo. A partir dessa conexão mostraremos as diferenças básicas do princípio variacional de Kohn e Schwinger. Mostraremos, em verdade, que o princípio variacional de Kohn é um princípio variacional para o operador $T - V$ e, o princípio variacional de Schwinger um princípio variacional para o operador T [19]. A partir daí podemos gerar, em conexão com o método de expansões separáveis, princípios variacionais mais complexos e que se relacionam entre si pela escolha adequada das funções para a expansão do kernel. Contudo parece não haver conexão entre um princípio variacional de Kohn e um princípio variacional de Schwinger. Veremos que vantagens e desvantagens existem na aplicação prática das expansões obtidas sendo que o caminho para a escolha da melhor expansão torna-se um problema de importância para a obtenção de bons resultados.

2.2 Operadores de Ordem Finita

Consideremos um kernel dado na forma

$$\mathcal{O} = AC^{-1}B \quad (2.1)$$

e dois conjuntos de funções f_i e g_j , de quadrado integrável, que satisfaçam as seguintes condições

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_i^N |f_i\rangle \langle f_i| = 1, \quad (2.2)$$

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \sum_j^N |g_j\rangle\langle g_j| = 1, \quad (2.3)$$

ou seja f_i e g_j formam um conjunto completo de funções no espaço L_2 e, as Eqs.(2.2-2.3) são as chamadas relações de completeza.

Podemos escrever uma expressão para o operador (2.1) utilizando as relações de completeza acima, tal que

$$\mathcal{O}_N = \sum_{ij}^N A |f_i\rangle\langle f_i| C^{-1} |g_j\rangle\langle g_j| B \quad (2.4)$$

onde $D_{ij} = \langle f_i|C^{-1}|f_j\rangle$ e, portanto,

$$(D^{-1})_{ji} = \langle g_j|C|f_i\rangle. \quad (2.5)$$

De um ponto de vista prático esperamos que quando N é suficientemente grande o conjunto de funções f_i e g_j expanda uma relevante parte do espaço de Hilbert que contém o operador \mathcal{O} de tal modo a termos

$$\langle f_i|\mathcal{O}|g_j\rangle = \langle f_i|\mathcal{O}_N|g_j\rangle. \quad (2.6)$$

Deste modo podemos, em princípio, aproximar o operador dado pela Eq.(2.1) através do operador Eq.(2.4) com precisão arbitrária. Isto é bastante útil já que o resultado permite que tratemos problemas formulados num espaço de dimensão infinita (espaço de Hilbert) em um espaço de dimensão finita. Esse método ilustra o que fazemos frequentemente em mecânica quântica para passarmos de um espaço de dimensão infinita para um espaço de dimensão finita.

Consideremos agora a equação de Lippmann-Schwinger na forma operatorial para a matriz- T ;

$$T = V + VG_0T \quad (2.7)$$

$$= V + TG_0V. \quad (2.8)$$

Por manipulações algébricas podemos escrever a Eq.(2.7) em diferentes modos

$$T = V(1 - G_0V)^{-1}1, \quad (2.9)$$

$$= 1(1 - VG_0)^{-1}V, \quad (2.10)$$

$$= 1(V^{-1} - G_0)^{-1}1, \quad (2.11)$$

$$= V(V - VG_0V)^{-1}V. \quad (2.12)$$

Analogamente ao que fizemos para encontrar a expansão para o operador \mathcal{O}_N , queremos aqui encontrar expansões para os operadores Eqs.(2.9-2.12). Deste modo a equação (2.9) fica

$$T_N = \sum_{ij} V|f_i\rangle\langle f_i|(1 - G_0V)^{-1}|g_j\rangle\langle g_j|, \quad (2.13)$$

onde

$$D_{ij} = \langle f_i|(1 - G_0V)^{-1}|g_j\rangle, \quad (2.14)$$

e portanto

$$(D^{-1})_{ji} = \langle g_j|(1 - G_0V)|f_i\rangle. \quad (2.15)$$

A equação (2.13) pode ser obtida diretamente da equação de Lippmann-Schwinger e a ela se equivale se resolvermos a Eq.(2.7) utilizando um potencial separável da forma

$$V = \sum_{ij}^N |f_i\rangle D_{ij} \langle g_j|, \quad (2.16)$$

com

$$(D^{-1})_{ji} = \langle g_j|f_i\rangle. \quad (2.17)$$

Essa forma separável de se utilizar um potencial para a solução da equação de Lippmann-Schwinger é bastante usada em física nuclear. A equação de Lippmann-Schwinger assim resolvida toma uma forma fechada e mais simples que para potenciais locais¹. A utilização de potenciais não locais desse tipo foi inicialmente introduzida por Yamaguchi e, mais tarde

¹Potenciais separáveis são não-locais e portanto não têm a forma exigida para potenciais que “simulam” a troca de um pion (“one pion exchange potential”), mesmo assim esses potenciais são bastante úteis para estudos teóricos sobre a força nuclear, especialmente para o estudo da matriz- T fora da camada de energia.

por Tabakin e Mongan[20]. Assim a principal vantagem da expansão (2.16), fomalmente equivalente a equação de Lippmann-Schwinger, é que podemos tratar certos problemas em física nuclear de dois e três corpos de uma maneira mais fácil que resolver a equação integral original .

Da Eq.(2.11) nós podemos tirar a seguinte expansão

$$T_N = \sum_{i,j}^N |f_i\rangle D_{ij} \langle g_j| \quad (2.18)$$

com

$$(D^{-1})_{ji} = \langle g_j | (V^{-1} - G_0) | f_i \rangle, \quad (2.19)$$

$$= B_{ji} - \langle g_j | G_0 | f_i \rangle, \quad (2.20)$$

onde

$$B_{ji} = \sum_{n,m} \langle g_j | f_n \rangle C_{nm} \langle f_m | f_i \rangle$$

e

$$(C^{-1})_{mn} = \langle f_m | V | f_n \rangle.$$

Outra possibilidade de expansão é a partir da Eq.(2.12). Aplicando a mesma técnica que aplicamos para o operador \mathcal{O}_N nós obtemos

$$T_N = \sum_{i,j=1}^N V | f_i \rangle D_{ij} \langle f_j | V, \quad (2.21)$$

$$(D^{-1})_{ji} = \langle f_j | (V - V G_0 V) | f_i \rangle, \quad (2.22)$$

é facilmente observado das equações anteriores que essas são independentes da normalização das funções utilizadas para fazermos as expansões.

Um interessante aspecto pode ser observado da expansão obtida para a matriz- T Eq.(2.18). Se considerarmos um potencial separável tal que

$$V_N = \sum_{i,j}^N V | f_i \rangle J_{ij} \langle f_j | V, \quad (2.23)$$

e

$$(J^{-1})_{ji} = \langle f_j | V | f_i \rangle \quad (2.24)$$

Substituindo a Eq.(2.23) na equação para a matriz- T , Eq.(2.7), obtemos novamente a expansão dada pela Eq.(2.21). Portanto essa expansão, Eq.(2.21), é equivalente a resolvermos a equação original de Lippmann-Schwinger para um potencial separável da forma dada pela Eq.(2.23).

Analogamente, podemos utilizar um potencial separável da forma

$$V_N = \sum_{i,j=1}^N |g_i\rangle H_{ij} \langle g_j|, \quad (2.25)$$

com $H_{ji} = \langle g_j | V | g_i \rangle$. Substituindo a Eq.(2.25) na Eq.(2.7) obtemos a expansão dada pela Eq.(2.18).

Assim percebemos que o método de expansões separáveis conduz a várias aproximações possíveis para a matriz- T que embora formalmente equivalentes a equação de Lippmann-Schwinger podem na prática (quando truncamos a soma no conjunto completo para realizar os cálculos) dar resultados diferentes para cada valor de N das diferentes funções utilizadas.

Outras formas de expansões ainda são possíveis. Consideremos a Eq.(2.10), inserindo $G_0 G_0^{-1}$ entre V e $(1 - G_0 V)^{-1}$ nessa equação nós obtemos

$$T = V G_0 (G_0 - G_0 V G_0)^{-1} \quad (2.26)$$

e, pelo processo que temos utilizado para obter as várias expansões anteriores, temos

$$T_N = \sum_{i,j=1}^N V G_0 |f_i\rangle D_{ij} \langle f_j|, \quad (2.27)$$

e

$$(D^{-1})_{ji} = \langle f_j | (G_0 - G_0 V G_0) | f_i \rangle. \quad (2.28)$$

Podemos contruir ainda mais expansões para a matriz- T partindo de uma outra definição dada por

$$T = V + VG^{(+)}V, \quad (2.29)$$

onde $G^{(+)} = (E - H + i0)^{-1}$ é a função de Green completa. Inserindo um conjunto completo de funções $\{f_i\}$ entre V e G^+ , de ambos os lados, obtemos

$$T_N = V + \sum_{i,j}^N V|f_i\rangle D_{ij} \langle \hat{f}_j|V \quad (2.30)$$

$$(D^{-1})_{ji} = \langle \hat{f}_i|(E - H)|f_j\rangle \quad (2.31)$$

Essa expressão que será utilizada diversas vezes nesta dissertação foi inicialmente obtida por Takatsuka e Mackoy[26]. Apesar dessa expansão não necessitar do cálculo de elementos de matriz envolvendo a função de Green G_0 e deste modo ser a mais simples das expansões que apresentamos aqui, ela foi até recentemente subutilizada. O problema está na ocorrência de singularidades espúrias que ocorrem no cálculo do determinante da matriz D_{ij} , quando as funções utilizadas para a expansão são reais. Essas singularidades que não estão associadas a ocorrência de estados ligados ou ressonantes foi a grande dificuldade que levou a não utilização da expansão dada pela Eq.(2.30). Assim uma escolha possível para evitar a singularidade no determinante da matriz D_{ij} é fazer

$$\langle \hat{f}_j| = \langle g_j|G_0,$$

Deste modo, se obtém outra expansão para a matriz- T

$$T_N = V + \sum_{i,j=1}^N |f_i\rangle D_{ij} \langle g_j|G_0V, \quad (2.32)$$

onde

$$(D^{-1})_{ji} = \langle g_j|(1 - G_0V)|f_i\rangle. \quad (2.33)$$

Todas as expansões apresentadas têm suas vantagens e desvantagens, muitas delas já citadas. Mas um aspecto bastante interessante e útil é que todas essas expansões podem ser derivadas das expressões variacionais obtidas por Schwinger ou Kohn para os operadores T e $T - V$, respectivamente. Esse fato amplia bastante nosso entendimento sobre a má

convêrgencia obtida em muitas das aplicações apresentadas na literatura de algumas das expansões apresentadas aqui.

2.3 Expressões Variacionais

Na seção anterior derivamos várias expansões para o operador T e $T - V$, é claro que no limite quando N for grande elas são formalmente equivalentes à solução da equação original de Lippmann-Schwinger. Contudo, foi mostrado inicialmente por Adhikari e Sloan[28] que a expansão dada pela Eq.(2.21) é equivalente a expressão variacional de Schwinger para a matriz- T . Essa correspondência entre as expansões dadas na seção anterior foi convenientemente explorada por S.K. Adhikari e L. Tomio [19] onde se relacionam as diversas expansões obtidas e as expressões variacionais de Schwinger e Kohn. Baseados nos resultados desse trabalho mostraremos aqui a conexão existente entre os princípio variacionais de Schwinger e Kohn e as expansões obtidas na seção anterior.

Em termos da matriz- T o princípio variacional de Schwinger[6] é dado por

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | T | \vec{p}' \rangle &= \langle \vec{p} | V | \psi_{\vec{p}'}^{(+)} \rangle + \langle \psi_{\vec{p}}^{(-)} | V | \vec{p}' \rangle \\ &- \langle \psi_{\vec{p}}^{(-)} | (V - V G_0 V) | \psi_{\vec{p}'}^{(+)} \rangle, \end{aligned} \quad (2.34)$$

Podemos mostrar que, se $\psi_{\vec{p}'}^{(+)}$ e $\psi_{\vec{p}}^{(-)}$ são funções tentativa (“trial functions”), ou seja

$$\psi_{\vec{p}'}^{(+)}|_t = \psi_{\vec{p}'}^{(+)} + \delta\psi_{\vec{p}'}^{(+)}, \quad (2.35)$$

$$\psi_{\vec{p}}^{(-)}|_t = \psi_{\vec{p}}^{(-)} + \delta\psi_{\vec{p}}^{(-)}, \quad (2.36)$$

a expressão variacional (2.34) é realmente uma expressão variacional para a matriz- T que difere da expressão exata por termos de segunda ordem. Pode-se verificar também que se $\psi_{\vec{p}'}^{(+)}$ e $\psi_{\vec{p}}^{(-)}$ exatas satisfazem a equação de Lippmann-Schwinger,

$$|\psi_{\vec{p}}^{(+)}\rangle = |\vec{p}'\rangle + G_0 V |\psi_{\vec{p}}^{(+)}\rangle, \quad (2.37)$$

$$\langle \psi_{\vec{p}}^{(-)} | = \langle \vec{p}' | + \langle \psi_{\vec{p}}^{(-)} | G_0 V, \quad (2.38)$$

então a Eq.(2.34) é uma identidade. O aspecto interessante e de capital importância é que podemos mostrar que a partir da Eq.(2.34) podemos obter a expansão dada pela Eq.(2.21). Para isso basta que escrevamos as funções tentativas, Eqs.(2.35) e (2.36), em termos de um conjunto de funções variacionais $\{f_i\}$,

$$|\psi_{\vec{p}}^{(+)}\rangle = \sum_i^N a_i |f_i\rangle, \quad (2.39)$$

$$\langle \psi_{\vec{p}}^{(-)} | = \sum_j^N b_j \langle f_j |. \quad (2.40)$$

Substituindo (2.39) e (2.40) e variando a Eq.(2.34), independentemente, em termos dos $\{a_i\}$ e $\{b_j\}$ nós obtemos

$$\frac{\delta(\langle \vec{p}' | T | \vec{p}' \rangle)}{\delta a_i} = 0 \rightarrow b_j = \sum_i \langle \vec{p}' | V | f_i \rangle D_{ij}, \quad (2.41)$$

$$\frac{\delta(\langle \vec{p}' | T | \vec{p}' \rangle)}{\delta b_j} = 0 \rightarrow a_i = \sum_j D_{ij} \langle f_j | V | \vec{p}' \rangle. \quad (2.42)$$

Voltando novamente para a Eq.(2.34) com os valores acima obtidos nós temos

$$\langle \vec{p}' | T_N | \vec{p}' \rangle = \sum_{i,j=1}^N \langle \vec{p}' | V | f_i \rangle D_{ij} \langle f_j | V | \vec{p}' \rangle, \quad (2.43)$$

onde os elementos $(D^{-1})_{ji}$ já foram definidos pela Eq.(2.22). Esse resultado tem um aspecto teórico e prático que deve ser ressaltado. Primeiro é que mesmo os matemáticos sabendo de que o método de expansão de um operador, ou kernel de uma equação integral, em termos de um conjunto completo de funções de fato simplificava problemas bastante complicados, a conexão do método de expansões separáveis e método o método variacional e bastante recente. O aspecto de grande utilidade prática, conforme mostraremos, é que isso trouxe

uma grande otimização nos cálculos envolvidos na obtenção de quantidades características do espalhamento quântico.

Pela escolha adequada das funções que expandimos, por exemplo a Eq.(2.18), podemos relacioná-la a um princípio variacional de Schwinger ou Kohn. Assim se nas Eqs.(2.18-2.19) tomarmos $|f_i\rangle = V|f_i\rangle$ e $\langle f_j| = \langle g_j|V$ podemos escrever uma expressão variacional equivalente a Eq.(2.34),

$$\langle \vec{p}|T|\vec{p}'\rangle = \langle \vec{p}|\chi_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle + \langle \chi_{\vec{p}}^{(-)}|\vec{p}'\rangle - \langle \chi_{\vec{p}}^{(-)}|(V^{-1} - G_0)|\chi_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle. \quad (2.44)$$

A expressão acima é idêntica a Eq.(2.34) com as funções exatas $|\chi^{(+)}\rangle$ e $\langle \chi^{(-)}|$ satisfazendo

$$|\chi_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle = V|\psi_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle \quad (2.45)$$

$$\langle \chi_{\vec{p}}^{(-)}| = \langle \psi_{\vec{p}}^{(+)}|V \quad (2.46)$$

Assim, se escolhermos um conjunto de funções para expandir as funções tentativas $|\chi_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle$ e $\langle \chi_{\vec{p}}^{(-)}|$ tal que

$$|\chi_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle = \sum_i a_i |g_i\rangle, \quad (2.47)$$

$$\langle \chi_{\vec{p}}^{(-)}| = \sum_j \langle g_j| b_j, \quad (2.48)$$

e, deste modo, fazendo as variações arbitrárias da Eq.(2.44) em termos dos $\{a_i\}$ e $\{b_j\}$, independentemente, nós obtemos novamente a expansão dada pela Eq.(2.18).

As expansões para o operador $T-V$, Eqs.(2.30-2.32), ao contrário das expansões anteriores, são derivadas da expressão variacional para o operador $T - V$ dada por Kohn[3]:

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}|T|\vec{p}'\rangle &= \langle \vec{p}|V|\vec{p}'\rangle + \langle \vec{p}|V|\hat{\chi}_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle + \langle \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(-)}|V|\vec{p}'\rangle \\ &- \langle \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(-)}|(G_0^{-1} - V)|\hat{\chi}_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle, \end{aligned} \quad (2.49)$$

onde as funções exatas $|\hat{\chi}_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle$ e $\langle \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(-)}|$ satisfazem

$$|\hat{\chi}_{\vec{p}}^{(+)}\rangle = G_0 V |\psi_{\vec{p}}^{(+)}\rangle. \quad (2.50)$$

$$\langle \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(-)} | = \langle \psi_{\vec{p}}^{(-)} | G_0 V. \quad (2.51)$$

Escrevemos as funções tentativa como

$$|\hat{\chi}_{\vec{p}}^{(+)}\rangle = \sum_i a_i |f_i\rangle, \quad (2.52)$$

$$\langle \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(-)} | = \sum_j \langle f_j | b_j, \quad (2.53)$$

substituímos na expressão variacional de Kohn Eq.(2.49). Variamos $T - V$, em termos dos coeficientes de $\{a_i\}$ e $\{b_j\}$ com a condição $\delta(T - V) = 0$, ou seja

$$\frac{\delta(\langle \vec{p} | (T - V) | \vec{p}' \rangle)}{\delta a_i} = 0 \rightarrow b_j = \sum_i \langle \vec{p} | V | f_i \rangle D_{ij}, \quad (2.54)$$

$$\frac{\delta(\langle \vec{p} | (T - V) | \vec{p}' \rangle)}{\delta b_j} = 0 \rightarrow a_i = \sum_j D_{ij} \langle f_j | V | \vec{p}' \rangle. \quad (2.55)$$

com os elementos da matriz inversa dados por

$$(D^{-1})_{ji} = \langle f_j | (G_0^{-1} - V) | f_i \rangle = \langle f_j | (E - H) | f_i \rangle \quad (2.56)$$

Deste modo, recuperamos a expansão dada pela Eq.(2.30) através da expressão variacional de Kohn. Portanto a resolução da Eq.(2.30), para um conjunto de funções variacionais, é equivalente a solução da Eq.(2.49). A expansão dada pela Eq.(2.32) também pode ser tirada de a partir da expressão variacional de Kohn, Eq.(2.49). Consideremos a expressão para a matriz- T dada por

$$\begin{aligned} \langle \vec{p} | T | \vec{p}' \rangle &= \langle \vec{p} | V | \vec{p} \rangle + \langle \vec{p} | V | \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(+)} \rangle + \langle \chi_{\vec{p}}^{(-)} | G_0 V | \vec{p}' \rangle \\ &- \langle \chi_{\vec{p}}^{(-)} | (1 - G_0^{-1} V) | \hat{\chi}_{\vec{p}}^{(+)} \rangle, \end{aligned} \quad (2.57)$$

que é estacionária com relação a pequenas variações das funções $|\hat{\chi}_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle$ e $\langle\chi_{\vec{p}'}^{(-)}|$. Aqui a função $\langle\chi_{\vec{p}'}^{(-)}|$ é definida pela Eq.(2.45). Escrevendo essas funções em termos de um conjunto completo

$$|\hat{\chi}_{\vec{p}'}^{(+)}\rangle = \sum_i a_i |f_i\rangle, \quad (2.58)$$

$$\langle\chi_{\vec{p}'}^{(-)}| = \sum_j \langle g_j | b_j, \quad (2.59)$$

na Eq.(2.57). Obteremos, depois da variação da Eq.(2.57) em termos dos coeficientes $\{a_i\}$ e $\{b_j\}$, a expansão dada pela Eq.(2.32).

Na sequência, nos capítulos 3 e 4, desenvolvemos e aplicamos o formalismo aqui apresentado para o espalhamento NN em canais desacoplados e acoplados, respectivamente.

Capítulo 3

O Princípio Variacional de Kohn Complexo em Canais Desacoplados

3.1 Introdução

Recentemente foi sugerido e aplicado o princípio variacional de Kohn complexo na solução da equação de Lippmann-Schwinger[24] para o potencial de Reid[22] 1S_0 (“soft-core”). Nas aplicações feitas em Física Nuclear para o cálculo das quantidades características do espalhamento nucleon-nucleon(NN) esse método tem se mostrado vantajoso em relação a outros métodos, tais como: método de inversão direta, método iterativo e método variacional de Schwinger. Apesar de não ser o método que dê resultados numéricos mais precisos, tem-se mostrado vantajoso por resultar em matrizes de dimensões reduzidas e, portanto, exigindo pouco esforço computacional.

O principal objetivo desse trabalho[25]¹ é mostrar que o princípio variacional de Kohn complexo é o método ideal para o tratamento de sistemas de poucos nucleons, em que se considera a interação de dois nucleons com potenciais NN realísticos. Tendo em vista esse objetivo, neste capítulo mostraremos a eficiência do método variacional de Kohn.

¹Os resultados apresentados neste capítulo estão parcialmente presentes na ref.[25].

Aplicaremos esse método para outros potenciais, de interesse físico, para diferentes ondas parciais. Para isso utilizaremos os potenciais fenomenológicos de Reid: $V(^1S_0)$, $V(^1P_1)$ e $V(^1D_2)$. Esses potenciais já foram utilizados anteriormente por outros métodos para cálculo das quantidades características do espalhamento e, portanto, possibilita-nos uma comparação com o método apresentado neste trabalho.

3.2 O Princípio Variacional de Kohn Complexo

Nas seções anteriores vimos como é possível obter expressões variacionais para os elementos do operador T e $T-V$. Nas aplicações feitas das expansões da Sec.(2.2)[19] as funções variacionais são reais. Recentemente foi proposto por Miller e op de Haar[23] uma base de funções para o princípio variacional de Kohn que utiliza-se de funções de variável complexa.

Como vimos nas Secs.(2.2)-(2.3) o princípio variacional de Kohn é baseado na expressão para a matriz- T dada por

$$t(E) = V + VG^{(\pm)}(E)V \tag{3.1}$$

onde

$$G^{(\pm)}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{E - H \pm i\epsilon} \tag{3.2}$$

e V é o potencial de interação, $G^\pm(E)$ é a função de Green para o Hamiltoniano completo $H = H_0 + V$.

O princípio variacional de Kohn Complexo para a equação (3.1) se resume na escolha de uma base de funções variacionais $\{u_n\}$ para a expansão da função de Green completa (3.2) que incorpora as condições de contorno corretas. Portanto o que necessitamos é a forma variacional para a função de Green completa (3.2) que extremize, pela variação dos parâmetros das funções da base $\{u_n\}$, a expressão para $T - V$ [19].

Consideremos uma forma funcional para a função de Green (3.2), dada por

$$\langle f|G^{(+)}(E)|g\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle f|(E - H + i\epsilon)|g\rangle \quad (3.3)$$

onde $|f\rangle$ e $\langle g|$ são estados arbitrários de $G^{(+)}(E)$ e, consideremos, também, o funcional I

$$I = \langle f|\psi\rangle + \langle \tilde{\psi}|g\rangle + \langle \tilde{\psi}|(H - E)|\psi\rangle \quad (3.4)$$

onde $|\psi\rangle$ e $\langle \tilde{\psi}|$ são funções de onda “tentativa” independentes. Pode-se mostrar que o funcional (3.4) é na verdade a expressão variacional de Kohn para o operador $T - V$ [3] dada por

$$\begin{aligned} \langle \vec{p}'|T - V|\vec{p}\rangle &= \langle \hat{\chi}_{\vec{p}'}^-|V|\vec{p}\rangle + \langle \vec{p}'|V|\hat{\chi}_{\vec{p}}^+\rangle \\ &- \langle \hat{\chi}_{\vec{p}'}^-|G_0^{-1} - V|\hat{\chi}_{\vec{p}}^+\rangle, \end{aligned} \quad (3.5)$$

onde $|\hat{\chi}_{\vec{p}}^+\rangle$ e $\langle \hat{\chi}_{\vec{p}'}^-|$ são dados por

$$|\hat{\chi}_{\vec{p}}^+\rangle = G_0 V|\vec{p}\rangle + G_0 V|\hat{\chi}_{\vec{p}}^+\rangle \quad (3.6)$$

$$\langle \hat{\chi}_{\vec{p}'}^-| = \langle \vec{p}'|V G_0 + \langle \hat{\chi}_{\vec{p}'}^-|V G_0. \quad (3.7)$$

Assim, pela escolha das funções $|g\rangle$ e $\langle f|$ em (3.4), tal que $\langle f| = \langle \vec{p}'|V$ e $|g\rangle = V|\vec{p}\rangle$ e, portanto, $|\psi\rangle = |\hat{\chi}_{\vec{p}}^+\rangle$ e $\langle \tilde{\psi}| = \langle \hat{\chi}_{\vec{p}'}^-|$, veremos que, depois de algumas simples manipulações algébricas, as equações (3.4) e (3.5) são idênticas. Optamos, contudo, em trabalhar aqui com a Eq.(3.4) devido à sua forma simples e fácil de se manipular. Voltemos ao nosso problema original. Queremos encontrar uma expressão variacional para Eq.(3.3), através do funcional I , Eq.(3.4). Variando I com respeito à variações arbitrárias de $|\psi\rangle$ e $\langle \tilde{\psi}|$, independentemente, e com a condição $\delta I = 0$, para cada variação, nós obtemos

$$|\psi\rangle = G^{(+)}(E)|g\rangle, \quad (3.8)$$

$$\langle \tilde{\psi}| = \langle f|G^{(+)}(E). \quad (3.9)$$

Por substituição direta das Eqs.(3.8-3.9) na Eq.(3.4) encontramos que

$$I = \langle f|G^{(+)}(E)|g\rangle, \quad (3.10)$$

ou seja, o funcional I é realmente uma expressão variacional para o operador $G(E)$ e as Eqs. (3.8) e (3.9), para as funções “tentativa”, nos dão o comportamento correto que $|\psi\rangle$ e $\langle\tilde{\psi}|$ (exatas) devem satisfazer. No entanto utilizar as Eqs.(3.8-3.9) nessa forma não nos ajuda muito. Podemos, entretanto, incorporar na base de funções $\{u_n\}$, uma importante informação contida nas Eqs.(3.8-3.9): o comportamento assintótico de $\langle\tilde{\psi}|$ e $|\psi\rangle$.

Vejamos o comportamento assintótico da expressão Eq.(3.8). Podemos escrever

$$\langle\tilde{r}|G|g\rangle = \langle\tilde{r}|G_0|h\rangle, \quad (3.11)$$

onde $|g\rangle$ satisfaz a seguinte equação

$$|h\rangle = |g\rangle + VG|h\rangle. \quad (3.12)$$

Portanto, podemos tirar o comportamento da função de Green completa em termos da função de Green da partícula livre. Da Eq.(3.11) nós obtemos

$$\langle\tilde{r}|G|g\rangle \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\frac{1}{4\pi} \frac{e^{ikr}}{r} \langle\psi^\mp|g\rangle. \quad (3.13)$$

aqui $\langle\psi^\mp|$ satisfaz a equação de Lippmann-Schwinger.

Há várias possíveis escolhas que incorporam o comportamento assintótico dado pela Eq.(3.13). Algumas possibilidades são

$$f'(r) = \frac{e^{ikr}}{r}(1 - e^{-\alpha r}), \quad (3.14)$$

$$g'(r) = \frac{e^{ikr} - e^{-\alpha r}}{r}, \quad (3.15)$$

$$h'(r) = (1 - e^{-\alpha r})\frac{\cos(kr)}{r} + i\frac{\sin(kr)}{r}. \quad (3.16)$$

Assim, como o que queremos é encontrar uma base $\{u_n\}$ que incorpore as condições de contorno “corretas”, podemos construir uma base $\{u_n\}$ que incorpore o comportamento,

assintótico e na origem, dado pelas Eqs.(3.8-3.9) para as funções $|\psi\rangle$ e $\langle\tilde{\psi}|$. Deste modo, escrever $|\psi\rangle$ e $\langle\tilde{\psi}|$ em termos das funções $\{u_n\}$,

$$\psi(r) = \sum_{n=0}^N a_n u_n(r) \quad (3.17)$$

$$\tilde{\psi}(r) = \sum_{m=0}^N b_m v_m(r) \quad (3.18)$$

Substituindo as equações acima em I dado por (3.4), e variando I com respeito a variações independentes dos coeficientes $\{a_n\}$ e $\{b_n\}$, impondo para cada variação que $\delta I = 0$, encontramos que

$$\frac{\delta I}{\delta b_m} = 0 \Rightarrow a_n = \sum_{m=0}^N D_{n,m} \langle v_m | g \rangle, \quad (3.19)$$

e

$$\frac{\delta I}{\delta a_n} = 0 \Rightarrow b_m = \sum_{n=0}^N \langle f | u_n \rangle D_{n,m}, \quad (3.20)$$

com

$$(D^{-1})_{mn} = \langle v_m | E - H | u_n \rangle. \quad (3.21)$$

Substituindo as equações (3.19) e (3.20) em (3.17) e (3.18), respectivamente, e voltando novamente para (3.4), obtemos

$$\langle f | G^{(+)}(E) | g \rangle = \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^N \langle f | v_m \rangle \langle v_m | (E - H)^{-1} | u_n \rangle \langle u_n | g \rangle, \quad (3.22)$$

ou, de uma forma mais compacta,

$$[G^{(+)}(E)]_N = \sum_{n,m=0}^N |u_n\rangle D_{nm} \langle v_m|. \quad (3.23)$$

Com o resultado acima podemos escrever uma expansão separável para a matriz- T , na forma

$$T_N(E) = V + V |u_n\rangle D_{n,m} \langle v_m | V, \quad (3.24)$$

com

$$(D^{-1})_{mn} = \langle v_m | (E - H) | u_n \rangle, \quad (3.25)$$

que é chamada de aproximação degenerada para a função de Green completa. A expressão (3.24)-(3.25), neste contexto, é o resultado básico da referência [23]. Lembramos, contudo, que essa expansão já fora obtida anteriormente, num outro contexto, por Takatsuka e Mackoy [26] e por S.K. Adhikari e L. Tomio [19].

Do que expusemos acima, observamos que é possível construir expansão para o operador $T - V$ (3.25) que difere do princípio variacional de Kohn real pelo emprego de uma base de funções $\{u_n\}$ que incorporam o comportamento assintótico “correto” por meio de uma função de variável complexa. Podemos construir o conjunto $\{u_n\}$, $n = 0, 1, 2, \dots, N$, tal que u_0 seja uma função complexa e as demais funções, para $n = 1, 2, \dots, N$, como sendo reais e de quadrado integrável. A condição de contorno correta obtida pelas funções, Eqs. (3.8-3.9) impele-nos a uma definição do produto escalar. Devemos ter em virtude do comportamento de (3.8)-(3.9) um produto escalar tal que

$$\langle f^* | g \rangle = \int dr f(r)g(r), \quad (3.26)$$

ou seja,

$$\langle \psi | r \rangle = \langle r | \tilde{\psi} \rangle. \quad (3.27)$$

Dadas as considerações desta seção estamos aptos para aplicar o princípio variacional de Kohn complexo em um problema real. Na próxima seção apresentaremos o cálculo explícito dos elementos da *matriz-T* para um conjunto de funções $\{u_n\}$ escolhidas segundo o procedimento aqui delineado.

3.3 Decomposição em Ondas Parciais I

Nesta seção desenvolveremos a decomposição em ondas parciais da expansão variacional para o princípio variacional de Kohn, obtida na seção anterior equação (3.24). Podemos

escrever essa equação, no espaço dos momentos, como

$$\langle \vec{p}' | T | \vec{p} \rangle = \langle \vec{p}' | V | \vec{p} \rangle + \sum_{\tau \tau'} \langle \vec{p}' | V | u_{\tau} \rangle D_{\tau \tau'} \langle u_{\tau'} | V | \vec{p} \rangle, \quad (3.28)$$

onde

$$(D^{-1})_{\tau' \tau} = \langle u_{\tau'} | (E - H) | u_{\tau} \rangle. \quad (3.29)$$

Aqui τ é um certo conjunto de números quânticos e índices de interesse que servirão para rotularmos a base que iremos trabalhar e serão especificados adiante.

Estaremos interessados aqui em aplicarmos o método variacional, estudado na seção anterior, para a solução da equação de Lippmann-Schwinger em um problema real em Física Nuclear. Trataremos especificamente do espalhamento NN nos canais 1S_0 , 1P_0 e 1D_2 , utilizando potenciais centrais e assumindo que a decomposição em ondas parciais dos potenciais utilizados são locais em cada onda parcial.

Consideremos, portanto, o estado $|plm_l\rangle$ representando um estado de momento p e com números quânticos angulares dados por l e m . Nós definimos esse estado no espaço dos momentos como

$$\langle \vec{p}' | plm_l \rangle = \left(\frac{\pi 2m}{2 \hbar^2} \right)^{1/2} \frac{\delta(p' - p)}{p^2} Y_{lm_l}(\hat{p}'), \quad (3.30)$$

onde m é a massa reduzida e assumimos que $|p'\rangle$ tenha uma normalização dada via função delta,

$$\langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle = \delta(\vec{p}' - \vec{p}), \quad (3.31)$$

então

$$\langle p' l' m' | plm_l \rangle = \left(\frac{\pi 2m}{2 \hbar^2} \right) \delta_{l'l'} \delta_{m_l m_l'} \frac{\delta(p' - p)}{p^2}, \quad (3.32)$$

e, é direto da Eq.(3.32), que o operador projeção nessa base é dado por

$$\left(\frac{2 \hbar^2}{\pi 2m} \right) \sum_{lm} \int_0^\infty p^2 dp |plm\rangle \langle plm| = 1. \quad (3.33)$$

Deste modo, a decomposição, em ondas parciais, da onda plana é

$$|\vec{p}\rangle = \left(\frac{2}{\pi} \frac{\hbar^2}{2m}\right)^{1/2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m_l=-l}^l |plm_l\rangle Y_{lm_l}^*(\hat{p}). \quad (3.34)$$

No espaço das coordenadas o estado $|plm_l\rangle$ tem a seguinte representação

$$\langle \vec{r} | plm_l \rangle = (2m/\hbar^2)^{1/2} i^l j_l(pr) Y_{lm_l}(\hat{r}), \quad (3.35)$$

onde as funções j_l são as conhecidas funções de Bessel esféricas.

Das equações acima obtemos a decomposição em ondas parciais dos operadores T e V ,

$$\langle \vec{p} | T | \vec{p}' \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \frac{\hbar^2}{2m}\right) \sum_{l,m} Y_{lm}(\hat{p}) Y_{lm}^*(\hat{p}') \langle p | T_l | p' \rangle, \quad (3.36)$$

$$\langle \vec{p} | V | \vec{p}' \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \frac{\hbar^2}{2m}\right) \sum_{l,m} Y_{lm}(\hat{p}) Y_{lm}^*(\hat{p}') \langle p | V_l | p' \rangle, \quad (3.37)$$

onde utilizamos o fato dos operadores T e V , serem diagonais nesta representação²

$$\langle plm_l | T | p'l'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \langle p | T_l | p' \rangle \quad (3.38)$$

e

$$\langle plm_l | V | p'l'm' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} \langle p | V_l | p' \rangle, \quad (3.39)$$

Com a normalização utilizada aqui o deslocamento de fase δ_l , está relacionado com os elementos da camada de energia (“on-shell”) da matriz- T por

$$\langle k | T_l | k \rangle = -\frac{e^{i\delta_l(k)} \text{sen}(\delta_l(k))}{k} \quad (3.40)$$

As funções u_r em (3.28), no espaço das coordenadas e momento, respectivamente, são dadas por

$$\langle \vec{r} | u_{nlm_l} \rangle = u_{nl}(r) i^l Y_{lm_l}(\hat{r}) \quad (3.41)$$

²De fato nas equações que estamos deduzindo aqui estamos levando em conta potencias centrais. Assim é um fato que o operador T e V são invariantes por rotações e, portanto, diagonais na representação $|lm_l\rangle$.

e

$$\langle \vec{p} | u_{nlm_l} \rangle = w_{nl}(p) Y_{lm_l}(\hat{p}) \quad (3.42)$$

A conveniência, em um problema em específico, nos guiará a uma escolha entre que a Eq.(3.41) ou a Eq.(3.42). As chamadas transformações de Henkel, que relacionam u_{nl} e w_{nl} , são

$$\begin{aligned} u_{nl}(r) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^\infty j_l(pr) w_{nl}(p) p^2 dp \\ w_{nl}(p) &= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^\infty j_l(pr) u_{nl}(r) r^2 dr \end{aligned} \quad (3.43)$$

Com as definições acima podemos reescrever a matriz- T já decomposta em ondas parciais

$$\langle p'l'|T|pl \rangle = \langle p'l'|V|pl \rangle + \sum_{nl,ml}^N \langle p'l'|V|u_{nl} \rangle D_{nl,ml} \langle u_{ml}|V|pl \rangle. \quad (3.44)$$

Vamos agora obter expressões gerais para os elementos de matriz necessários para se calcular, para cada onda parcial, a equação (3.44). Os termos de Born são dados por

$$\langle p'l'|V|pl \rangle = \int d\vec{r} \int d\vec{r}' \langle p'l'|\vec{r} \rangle \langle \vec{r}'|V|\vec{r} \rangle \langle \vec{r}'|pl \rangle \quad (3.45)$$

onde para potenciais centrais, nós temos

$$\langle \vec{r}'|V|\vec{r} \rangle = \delta(\vec{r}' - \vec{r}) V(r) \quad (3.46)$$

Deste modo a Eq.(3.45) fica

$$\langle p'l'|V|pl \rangle = \int d\vec{r} \langle p'l'|\vec{r} \rangle V_l(r) \langle \vec{r}|pl \rangle. \quad (3.47)$$

Os fatores de forma $\langle pl|V|u_{nl} \rangle$ no espaço das coordenadas são dados por

$$\langle pl|V|u_{nl} \rangle = \int d\vec{r} \langle p'l'|\vec{r} \rangle V_l(r) \langle \vec{r}|u_{nl} \rangle \quad (3.48)$$

Os elementos da matriz inversa $(D^{-1})_{ml,nl}$ são

$$(D^{-1})_{ml,nl} = \int d\vec{r} u_{ml}(\vec{r})(E - H)u_{nl}(\vec{r}). \quad (3.49)$$

3.4 Cálculo dos Elementos de Matriz

Da informação obtida da seção anterior sobre a forma assintótica que devemos incorporar no conjunto de funções $\{u_{nl}\}$, definimos agora o conjunto de funções

$$u_{0l}(r) = (1 - e^{-\alpha r})^{l+1} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (3.50)$$

$$u_{nl}(r) = r^l e^{-\alpha nr}. \quad (3.51)$$

Podemos ver facilmente que as Eqs.(3.50) e (3.51) satisfazem as condições de contorno para o problema, via Eqs.(3.8) e (3.9), tal que

$$u_{0l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l, \quad (3.52)$$

$$u_{0l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (3.53)$$

e

$$u_{nl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} r^l, \quad (3.54)$$

$$u_{nl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad (3.55)$$

onde $n = 1, 2, \dots, N$ são funções reais de quadrado integrável, não ortogonais e não normalizáveis e α é o parâmetro variacional não linear que será variado para se obter a melhor convergência. Aqui fica claro o papel da função de corte $(1 - e^{-\alpha r})$ que regulariza o comportamento da função u_{0l} na origem.

Como dissemos na seção anterior a base de funções $\{u_{nl}\}$, $n = 1, 2, \dots, N$, pode ser, em princípio, qualquer conjunto de funções de quadrado integrável. A nossa particular escolha se deve ao fato dessa base já ter sido utilizada anteriormente e que essa escolha resulta em

integrais para os elementos da matriz- T que são muito simples, não havendo necessidade de se realizar integrações numéricas para se obter os elementos de matriz necessários para o caso de potenciais cuja dependência em r tenha uma forma analítica simples, como é o caso de potenciais do tipo Yukawa.

Da nova definição do produto escalar que fizemos na seção anterior, onde para obtermos as condições de contorno adequadas, utilizamos $u_0(r) = u_0^*(r)$, obteremos uma matriz complexa simétrica $D_{nl,ml}$ cujo determinante, $\det(D_{nl,ml})$, não apresenta na região física do espalhamento, singularidades espúrias ou outras “patologias” que eram encontradas com frequência na aplicação do princípio variacional de Kohn à matriz- K .

Assim dada a forma simples do conjunto de funções escolhidos, Eqs.(3.50-3.51), as integrais necessárias para obtermos os elementos de matriz (3.44), no espaço das coordenadas, para os potenciais $V(^1S_0)$, $V(^1P_1)$ e $V(^1D_2)$, os quais são combinações lineares de potenciais com diferente intensidades do tipo Yukawa, são analíticos e o problema computacional resultante se reduz quase que exclusivamente à inversão matricial de $D_{nl,ml}$ (3.44).

Os elementos da matriz- T que devemos calcular para um potencial genérico tipo Yukawa

$$V(r) = v_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}, \tag{3.56}$$

onde v_0 é uma constante, são os chamados termos de Born $\langle p' | V_l | p \rangle$ para cada onda parcial. Da Eq.(3.47) obtemos esses elementos facilmente:

$$\langle p' | V_l | p \rangle = \int_0^\infty r^2 dr j_l(p' r) V_l(r) j_l(p r), \tag{3.57}$$

onde nós omitimos o número quântico angular orbital l , já que trataremos aqui de casos onde $l = l'$, veja Eq.(3.47).

O fator de forma $\langle p' | V_l | u_{nl} \rangle$, Eq.(3.48), no espaço das coordenadas,

$$\langle p' | V_l | u_{nl} \rangle = \int_0^\infty r^2 dr j_l(p' r) v_l(r) u_{nl}(r). \tag{3.58}$$

A forma explícita dos elementos de matriz $(D^{-1})_{ml,nl}$, Eq.(3.49), serão encontradas a partir

de e os elementos de matriz $(D^{-1})_{ml,nl} = (D^{-1})_{nl,ml}$ definidos por³

$$\begin{aligned} (D^{-1})_{nl,ml} &= \langle u_{nl} | k^2 - H | u_{ml} \rangle \\ &= \int_0^\infty dr [r u_{nl}(r)] (k^2 - H) [r u_{ml}(r)], \end{aligned} \quad (3.59)$$

e pode ser verificado que a matriz $(D^{-1})_{ml,nl}$, que é simétrica e complexa, satisfaz

$$(D^{-1})_{ml,nl} = (D^{-1})_{nl,ml}. \quad (3.60)$$

Os termos de Born, e alguns termos da Eq.(3.59), podem ser calculados de maneira direta e simples utilizando a representação integral das funções de Bessel esféricas (Para definição veja apêndice A)

$$j_l(pr) = \frac{1}{2i^l} \int_{-1}^1 dt P_l(t) e^{iprt}, \quad (3.61)$$

onde $P_l(t)$ são os conhecidos polinômios de Hermite e a relação integral entre os polinômios de Hermite e as funções associadas de Legendre $Q_l(z)$,

$$Q_l(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dt \frac{P_l(t)}{(z-t)}. \quad (3.62)$$

Resolvendo a integral, Eq.(1.12), com as especificações acima encontramos uma expressão geral para os termos de Born

$$\langle p'l | V | pl \rangle = \langle p' | V_l | p \rangle = \frac{1}{2pp'} Q_l \left(\frac{p^2 + p'^2 + \mu^2}{2pp'} \right). \quad (3.63)$$

Na resolução da Eq.(3.58), quando $n = 0$, obtemos

$$\langle pl | V_l | u_{0l} \rangle = \frac{i^{l+1}}{p} \sum_{j=0}^{l+1} (-1)^j C_j^{l+1} Q_l \left[\frac{k + i(\mu + \alpha_j)}{p} \right], \quad (3.64)$$

para $n \neq 0$, nós temos

³Os cálculos apresentados nesta seção são dados em unidades de $2m/\hbar^2 = 41.47 \text{ MeV} - fm^2$.

$$\langle pl|V_l|u_{nl}\rangle = v_0 \frac{p^l(\sqrt{2})^{\frac{l(l+1)}{2}}}{[p^2 + \mu + \alpha n^2]^3}. \quad (3.65)$$

Os elementos de matriz Eq.(3.59), os quais envolvem o Hamiltoniano completo, $H = H_0 + V$, são dados explicitamente por

$$\begin{aligned} \langle u_{0l} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - V_l \right] | u_{0l} \rangle &= \left[-\alpha^2(l+1)^2 \sum_{j=0}^{2l} \frac{(-1)^j C_j^{2l}}{(2+j)\alpha - 2ik} \right. \\ &\quad - l(l+1) \sum_{j=0}^{2l+2} (-1)^j C_j^{2l+2} [j\alpha - 2ik] \ln[j\alpha - 2ik] \Big] \\ &\quad + v_0 \sum_{j=0}^{l+l'+2} (-1)^j C_j^{l+l'+2} \ln(\mu + j\alpha - 2ik), \end{aligned} \quad (3.66)$$

os termos cruzados ou termos “mistos” que envolvem as funções u_{0l} e u_{nl} são dados por

$$\begin{aligned} \langle u_{nl} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - V_l \right] | u_{0l} \rangle &\equiv \langle u_{0l} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) - V_l \right] | u_{nl} \rangle \\ &= -(l+1)! \sum_{j=0}^{l+1} (-1)^j C_j^{l+1} \frac{(n\alpha)^2 + 2\alpha n(\alpha j - ik) - k^2}{[\alpha(n+j) - ik]^{l+2}} \\ &\quad - l! v_0 \sum_{j=0}^{l'+1} (-1)^j C_j^{l'+1} [\mu + \alpha(n+j) - ik]^{-(l+1)}, \end{aligned} \quad (3.67)$$

$$\begin{aligned} \langle u_{nl} | \left[k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - v_l \right] | u_{ml} \rangle &= (2l+1)! \left[\frac{2(k^2 - nm\alpha^2)(l+1)}{[\alpha(m+n)]^{2L+3}} \right. \\ &\quad \left. - v_0 \frac{1}{[\alpha(n+m) + \mu]^{2l+2}} \right], \end{aligned} \quad (3.68)$$

As equações acima, Eqs.(3.63-3.68), valem para os canais $l = 0$, $l = 1$ e $l = 2$. e podem ser usadas para quaisquer potenciais do tipo Yukawa, Eq.(3.56). No problema que abordaremos a seguir utilizando os potenciais de Reid(RSC).

3.5 Resultados

Apresentamos aqui a aplicação da formulação variacional, desenvolvida nas secções anteriores, para a equação de Lippmann-Schwinger, para a obtenção das observáveis do espalhamento NN , ou seja; deslocamentos de fase e outras quantidades características do espalhamento. Os potenciais utilizados nesta aplicação são os potenciais de caroço mole (“soft-core”) de Reid[22]. Esses potenciais, cuja forma é bastante simples, constituem-se de combinações lineares do tipo Yukawa, tornam bastante simples as integrais necessárias ao cálculo dos elementos da *matriz-T*, veja equações (3.63-3.68). Faz-se necessário observar que apesar da “simplicidade” dos potenciais de Reid eles fitam bem os dados experimentais na faixa de energia a que se propõe e os resultados obtidos para os deslocamentos de fase são os mesmos que os obtidos com os potenciais derivados da teoria de mesons.

Os potenciais utilizados, nesta seção, são

$$V(^1S_0) = (-10.463e^{-\mu r} - 1650.6e^{-4\mu r} + 6484.2e^{-7\mu r})/\mu r \quad (3.69)$$

$$V(^1P_1) = (31.389e^{-\mu r} - 634.39e^{-2\mu r} + 2163.4e^{-3\mu r})/\mu r \quad (3.70)$$

$$V(^1D_2) = (-10.463e^{-\mu r} - 12.322e^{-2\mu r} - 1112.6e^{-4\mu r} \quad (3.71)$$

$$+ 6484.2e^{-7\mu r})/\mu r \quad (3.72)$$

onde $\mu \equiv mc/\hbar c = 0.7 fm^{-1}$, aqui m é a massa do pion. A unidade de $V(^1S_0)$, $V(^1P_1)$, $V(^1D_2)$ é dada MeV.

Para obtermos os deslocamentos de fase utilizamos a Eq.(3.44) tal que:

$$\delta_l = \arctan \frac{Im[\langle k|T_l|k \rangle]}{Re[\langle k|T_l|k \rangle]} \quad (3.73)$$

onde $Im[\langle k|T_l|k \rangle]$ e $Re[\langle k|T_l|k \rangle]$ são as partes imaginária e real da *matriz-T*, respectivamente. A razão de convergência entre os elementos da *matriz-T*, $\langle p'|T_l|k \rangle$ e $\langle k|T_l|k \rangle$, ou seja, entre os elementos de matriz na camada de energia (“on-shell”) e fora da camada de

energia (“off-shell”); as funções de Kowalski-Noyes, definidas por

$$f_l(p', k) = \frac{\langle p' | T_l | k \rangle}{\langle k | T_l | k \rangle}. \quad (3.74)$$

Nas tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 apresentamos os resultados obtidos, em diferentes energias para os deslocamentos de fase $\delta(^1S_0)$, $\delta(^1P_0)$ e $\delta(^1D_2)$. Por motivos de generalidade utilizamos o mesmo parâmetro variacional em todos os cálculos, $\alpha = 1.15 fm^{-1}$. Observa-se que há uma maior uniformidade na convergência para os deslocamentos de fase $\delta(^1P_1)$ e $\delta(^1D_2)$. Para essas ondas parciais a convergência se dá mais rapidamente, ou seja, para matrizes de dimensões entre 4×4 a 7×7 . Nesse caso o resultado converge na terceira casa decimal para praticamente todas as energias. Comparamos os nossos resultados com outros existentes na literatura obtidos por outros métodos variacionais (princípio variacional de Schwinger)[28] ou por outros métodos completamente diferentes, tais como: métodos de inversão matricial direta[22] e método iterativo[29]; quando disponíveis para os potenciais que estamos usando, ou para outros potenciais. Isso nos assegura a ausência de quaisquer problemas relativos a erros sistemáticos. Nas figuras 3.1, 3.2 apresentamos os mesmos resultados das tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 graficamente. Isso dá uma medida clara da razão de convergência, para os diversos potenciais, em termos do número de funções necessárias para uma boa convergência do método variacional aqui apresentado. Obtem-se maior estabilidade da convergência para as ondas parciais $l = 1$ e $l = 2$ a energias de até $72 MeV$. A energias altas, nesse contexto, há a necessidade de aumentarmos o número de funções u_{nl} para a expansão da equação (3.59) e, assim nossos resultados se aproximam mais dos valores utilizados como comparação. Acima desse valor os valores para todos os deslocamentos de fase não se mantêm com a mesma uniformidade que obtemos a baixas energias. Essa observação sugere a necessidade da variação do parâmetro α . Porém, em todos os casos há convergência se dá para matrizes de dimensões de no mínimo 4×4 e no máximo 10×10 . Veja tabela 3.1.

As funções de Kowalski-Noyes $f_l(pr)$, para $l = 0, 1, 2$, são apresentadas nas figuras (3.3), (3.4) e (3.5). Observa-se, também nesse caso, uma boa convergência principalmente para os potenciais nas ondas parciais $l = 1$ e $l = 2$. Nessas ondas parciais observa-se que mesmo para matrizes 2×2 a convergência, para as funções de KN, se mantém para momentos

de $\sim 4 \text{ fm}^{-1}$. O fato de tanto para o deslocamento de fase 1S_0 , quanto para a função de KN, a convêgencia não ser tão boa, comparativamente, se deve a presença de um caroço fortemente repulsivo no potencial de Reid(RSC, $l = 0$).

k	δ	δ_{RSC}	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$
0.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.5	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.6	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.7	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.9	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Figura 3.1: Deslocamento de fase δ em função de k para o potencial de Reid(RSC, $l = 0$).

k	δ	δ_{RSC}	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$
0.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.5	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.6	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.7	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.9	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Figura 3.2: Deslocamento de fase δ em função de k para o potencial de Reid(RSC, $l = 1$).

k	δ	δ_{RSC}	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$	$\delta_{\text{RSC}}^{\text{var}}$
0.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.1	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.2	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.3	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.4	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.5	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.6	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.7	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.8	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
0.9	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
1.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

Figura 3.3: Deslocamento de fase δ em função de k para o potencial de Reid(RSC, $l = 2$).

$E_{c.m.}$	N=1	N=2	N=3	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10
12	-1.5196	0.3244	0.6215	0.7665	0.8384	0.8557	0.8600	0.8604	0.8606	0.8606
24	1.4403	0.1087	0.4792	0.5932	0.6656	0.6800	0.6842	0.6844	0.6846	0.6849
48	1.3008	-0.4385	0.2291	0.3241	0.4218	0.4341	0.4397	0.4400	0.4402	0.4402
72	1.2432	-1.0789	-0.1217	0.0703	0.2428	0.2534	0.2625	0.2628	0.2630	0.2630
104	1.2183	1.4657	0.1877	-0.9166	0.0458	0.0514	0.0795	0.0796	0.0803	0.0803
152	1.2453	1.0935	-0.1415	0.1214	-0.1355	-0.1172	-0.1303	-0.1291	-0.1294	-0.1295
176	1.2809	1.0134	-0.2375	-0.0234	-0.2250	-0.2099	-0.2172	-0.2160	-0.2161	-0.2162

Tabela 3.1: Deslocamentos de fase $\delta(^1S_0)$ para o potencial “soft-core” de Reid

$E_{c.m.}$	N=1	N=2	N=3	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10
12	0.1992	0.0139	-0.0083	-0.0293	-0.0326	-0.0330	-0.0332	-0.0332	-0.0332	-0.0332
24	0.2462	-0.0069	-0.0361	-0.0670	-0.0710	-0.0713	-0.0713	-0.0713	-0.0713	-0.0712
48	-0.2199	-0.1241	-0.1549	-0.1878	-0.1902	-0.1899	-0.1897	-0.1896	-0.1896	-0.1896
72	-0.8641	-0.2733	-0.2830	-0.3099	-0.3102	-0.3104	-0.3110	-0.3115	-0.3118	-0.3121
104	-1.4821	-0.5148	-0.4338	-0.4496	-0.4500	-0.4531	-0.4553	-0.4563	-0.4566	-0.4567
152	1.2397	-1.0642	-0.6148	-0.6179	-0.6242	-0.6316	-0.6341	-0.6341	-0.6337	-0.6334
176	1.1185	-1.4466	-0.6895	-0.6896	-0.6996	-0.7077	-0.7092	-0.7087	-0.7081	-0.7079

Tabela 3.2: Deslocamentos de fase $\delta(^1P_1)$

$E_{c.m.}$	N=1	N=2	N=3	N=4	N=5	N=6	N=7	N=8	N=9	N=10
12	0.0267	0.0093	0.0103	0.0112	0.0112	0.0113	0.0113	0.0113	0.0113	0.0113
24	0.0642	0.0224	0.0238	0.0280	0.0282	0.0281	0.0281	0.0287	0.0282	0.0281
48	0.1767	0.0690	0.0550	0.0633	0.0622	0.0610	0.0605	0.0602	0.0600	0.0599
72	0.3293	0.1571	0.0825	0.0902	0.0895	0.0896	0.0897	0.0898	0.0900	0.0902
104	0.5718	0.3628	0.1095	0.1181	0.1207	0.1241	0.1247	0.1249	0.1249	0.1249
152	1.2140	0.9624	0.1330	0.1488	0.1541	0.1592	0.1583	0.1573	0.1567	0.1564
176	0.1465	1.4872	0.1376	0.1595	0.1633	0.1677	0.1661	0.1661	0.1651	0.1646

Tabela 3.3: Deslocamentos de fase $\delta(^1D_2)$

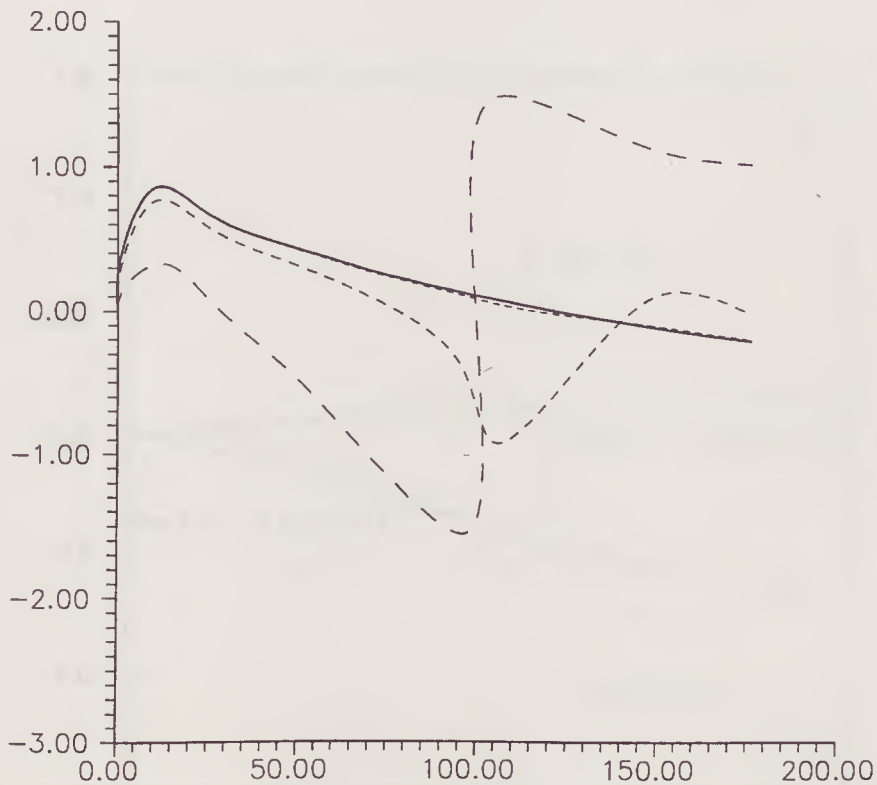


Figura 3.1: Deslocamento de fase $\delta(^1S_0)(rad) \times E(MeV)$. Observa-se que para um número pequeno de funções o deslocamento de fase tem um salto na região onde $\delta(k) = 0$. Isso se deve a problemas numéricos na convergência entre as partes imaginária e real da matriz- T nessa região.

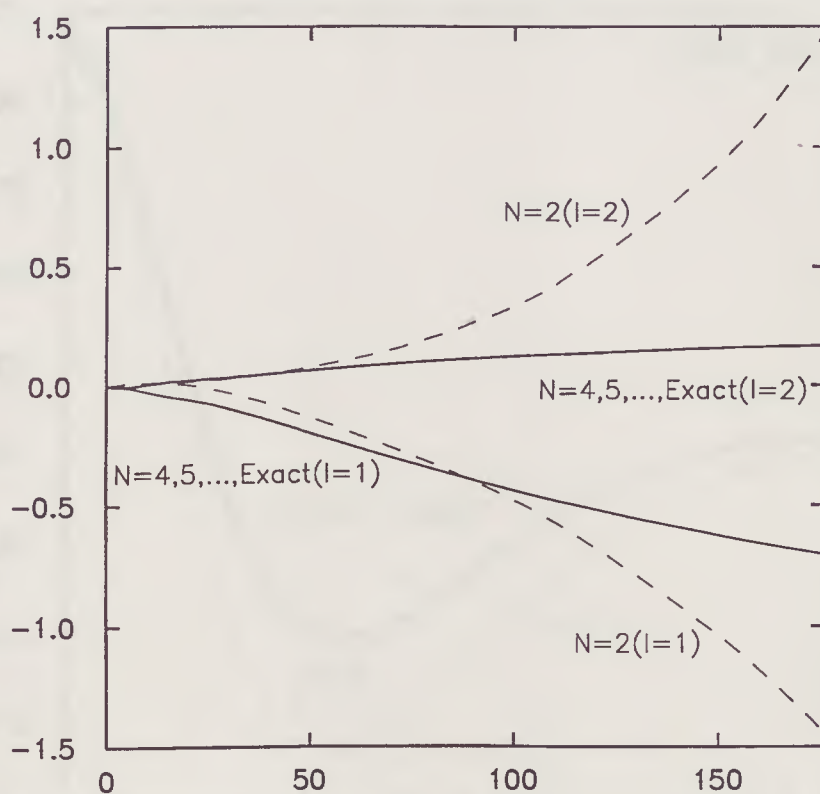


Figura 3.2: Deslocamentos de fase δ (1P_1) e δ (1D_2)(rad) $\times E$ (MeV).

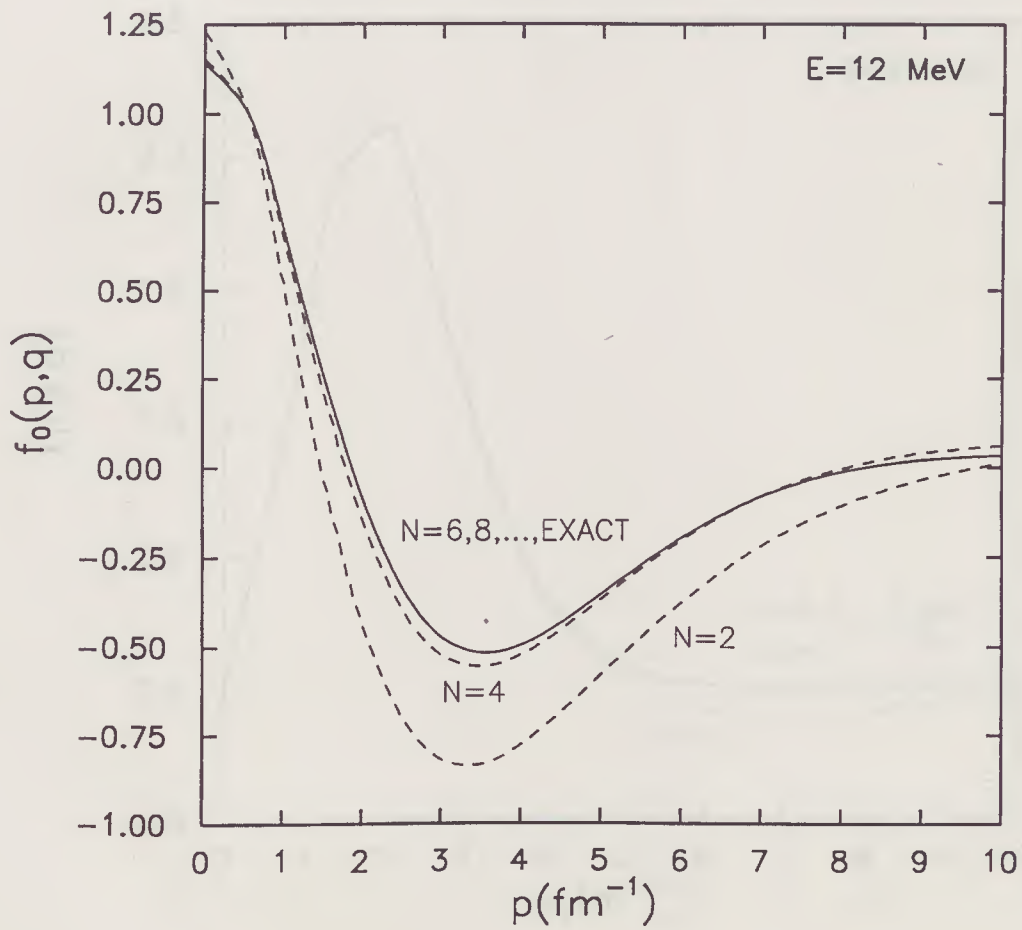


Figura 3.3: Função de Kowalski-Noyes para $l = 0$

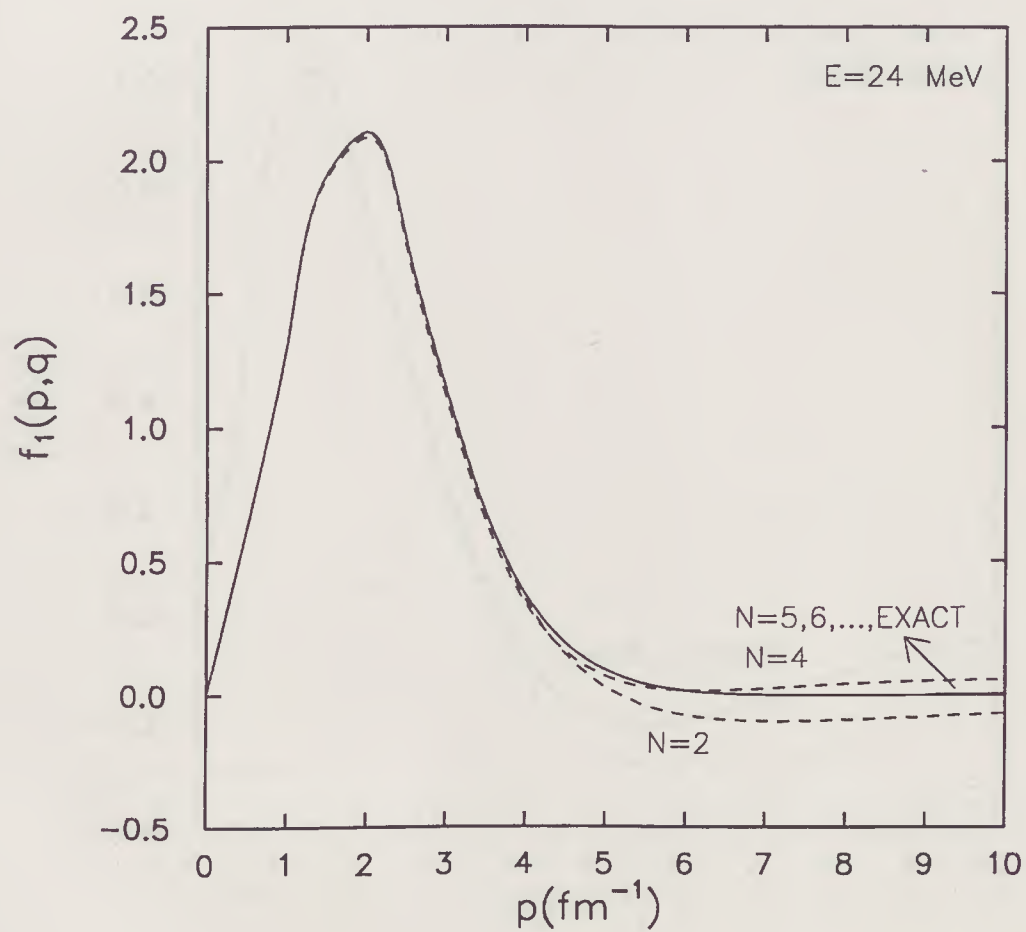


Figura 3.4: Função de Kowalski-Noyes para $l = 1$

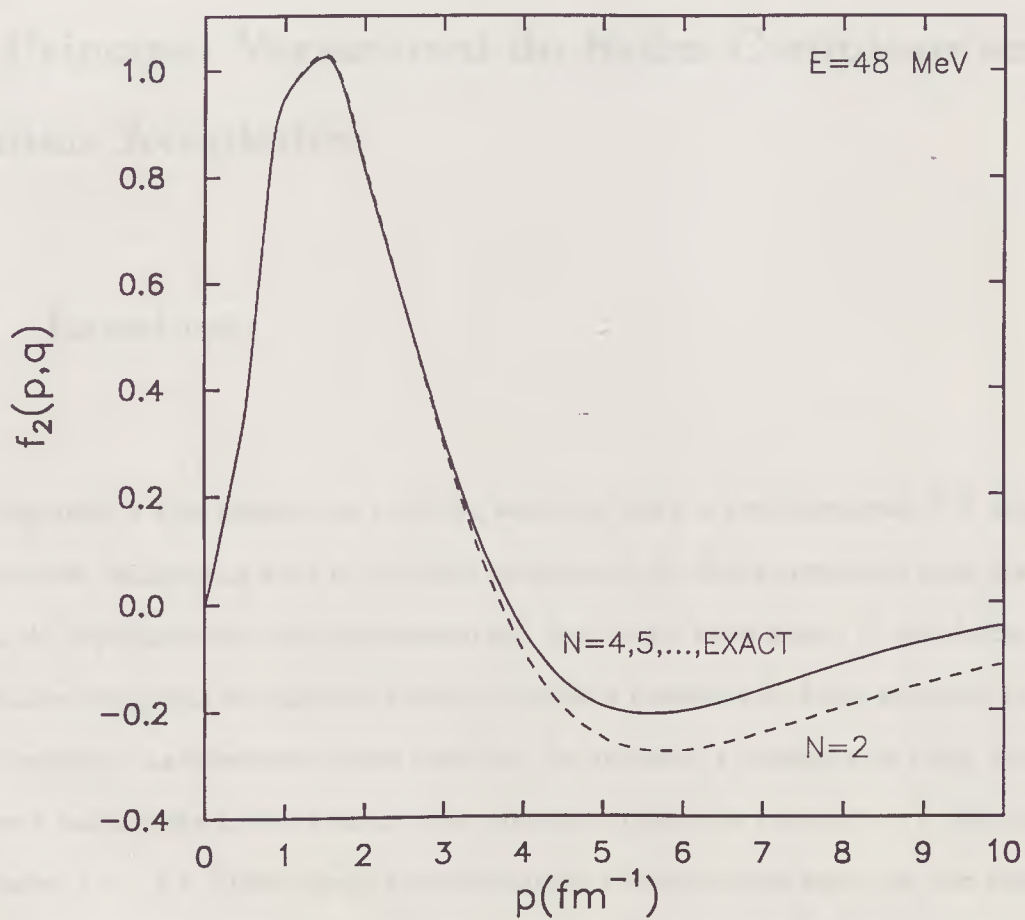


Figura 3.5: Função de Kowalski-Noyes para $l = 2$

Capítulo 4

O Princípio Variacional de Kohn Complexo em Canais Acoplados

4.1 Introdução

Seguindo o que fizemos no capítulo anterior, para o espalhamento NN em canais de-sacoplados, utilizamos aqui o princípio variacional de Kohn complexo para tratar o problema do espalhamento neutron-proton(np) em canais acoplados. O problema aqui difere dos casos estudados no capítulo anterior devido a presença da força tensorial no sistema np que “mistura” as diferentes ondas parciais. Na verdade, a presença da força tensorial neste sistema causa uma mistura entre dois estados tripleto de mesmo j e l diferindo de duas unidades, $l = j \pm 1$. Deste modo o espalhamento é determinado aqui por dois deslocamentos de fase e mais uma terceira quantidade ϵ_1 que indica a quantidade de mistura entre os dois deslocamentos de fase existente em um estado físico.

Como dissemos no capítulo 1, existem vários potenciais que procuram descrever o sistema np . Para a nossa proposta de estudar o desempenho do método variacional em um problema mais complicado e realístico, que os potenciais centrais utilizados no capítulo anterior, utilizaremos um potencial do tipo

$$V = V_c(r) + V_t(r)S_{12} + V_{ls}(r)\vec{L} \cdot \vec{S} \quad (4.1)$$

onde

$$S_{12} = 3(\vec{\sigma}_1 \cdot \hat{r})(\vec{\sigma}_2 \cdot \hat{r}) - \vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2 \quad (4.2)$$

e o acoplamento $\vec{L} \cdot \vec{S}$, spin-órbita, definido por

$$\vec{L} \cdot \vec{S} = \frac{1}{2}(\vec{l}_1 + \vec{l}_2) \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \quad (4.3)$$

com $\vec{\sigma}_1$ e $\vec{\sigma}_2$ sendo as matrizes de Pauli 2×2 . Esse potencial inclui o acoplamento spin-órbita e a força tensorial. Os termos $V_c(r)$ e $V_{ls}(r)$ na equação (4.1) que utilizaremos são os termos dados por Reid [22]. O termo tensorial $V_t(r)$ que utilizaremos é uma simplificação do $V_t(r)$ de Reid que foi obtido por Pieper[30]. Notamos que a versão simplificada do potencial de Reid de caroço mole(SRSC)¹ para o acoplamento ${}^3S_1 - {}^3D_1$ é numericamente equivalente ao potencial de Reid original. Assim os resultados obtidos para as quantidades características do espalhamento NN devem ser iguais aos obtidos por Reid. A razão de nossa escolha se deve ao fato de que o potencial de Reid(RSC) ser bastante utilizado na literatura e por ser um potencial fenomenológico que dá bons resultados para espalhamento np em baixas energias($E_{c.m.}$ entre 0 à aproximadamente 176 Mev). Portanto o desempenho do método para um potencial mais realístico pode certificar-nos da validade da princípio variacional de Kohn complexo para problemas reais em Física Nuclear e, assim, como uma alternativa simples e eficaz para o cálculo de observáveis de espalhamento e outras quantidades para o problema de dois ou três corpos utilizando potenciais atuais como os potenciais de Bonn[31] ou Paris[32]².

4.2 Decomposição em Ondas Parciais II

Nesta seção apresentaremos a decomposição em ondas parciais de uma maneira um pouco mais geral que fizemos no capítulo anterior quando estávamos estudando o espalha-

¹As abreviações para o potencial de Reid ou Pieper são utilizadas em diversos artigos. Por isso adotamos nesta dissertação. SRSC e RSC são “simplified Reid soft-core” e “Reid soft-core”.

²Há várias versões do potencial de Paris. A versão de 1980, conhecida como Paris80, consiste de um conjunto de funções tipo Yukawa que é uma representação fenomenológica do potencial de Paris original.

mento NN em canais desacoplados. No acoplamento que iremos estudar adiante, o canal ${}^3S_1 - {}^3D_1$, ou seja: $j = 1, s = 1$, teremos pela regra da adição de momentos angulares que, os possíveis momentos angulares $j = l \pm 1$. Assim não há conservação do momento angular mas sim do momento angular total j . Faremos portanto uma generalização das equações da seção 3.3 para problemas onde o momento angular l não é um bom número quântico. Consideremos, analogamente ao que fizemos no capítulo anterior, um estado $|p; l s j m_j\rangle$ que define um estado de momento p e números quânticos l, s, j e m_j . Definindo esse estado no espaço dos momentos como

$$\langle \vec{p}' | p; l s j m_j \rangle = \left(\frac{\pi 2\mu}{2 \hbar^2} \right)^{1/2} \frac{\delta(p' - p)}{p^2} \mathcal{Y}_{l s}^{j m_j}(\hat{p}'), \quad (4.4)$$

com a normalização

$$\delta(\vec{p}' - \vec{p}) = \langle \vec{p}' | \vec{p} \rangle, \quad (4.5)$$

onde l e s são o momento angular orbital total e o momento total de spin para o sistema NN , e j é o momento angular total, ou seja

$$\vec{j} = \vec{l} + \vec{s} \quad (4.6)$$

$$\vec{s} = \frac{1}{2}(\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2). \quad (4.7)$$

As funções \mathcal{Y} , que aparecem nas equações (4.4) em diante, são as chamadas funções spin angulares e serão definidas por:

$$\mathcal{Y}_{l s}^{j m_j}(\hat{p}) = \sum_{m_s, m_l} \langle l m_l s m_s | j m_j \rangle Y_{l m_l}(\hat{p}) | s m_s \rangle. \quad (4.8)$$

Da Eq.(4.4) podemos escrever a normalização em termos dos números quânticos de interesse

$$\langle p'; l' s' j' m_{j'} | p; l s j m_j \rangle = \left(\frac{\pi 2\mu}{2 \hbar^2} \right) \delta_{l, l'} \delta_{s, s'} \delta_{j, j'} \delta_{m_j, m_{j'}} \frac{\delta(p' - p)}{p^2}. \quad (4.9)$$

Podemos escrever a decomposição em ondas parciais da onda plana como

$$|\vec{p}\rangle = \left(\frac{2 \hbar^2}{\pi 2\mu} \right)^{1/2} \sum_{l s j m_j} |p; l s j m_j\rangle \mathcal{Y}_{l s}^{j m_j}(\hat{p}). \quad (4.10)$$

Nessa notação a representação no espaço das coordenadas de $|p; l s j m_j\rangle$ é

$$\langle \vec{r} | p; l s j m_j \rangle = (2\mu/\hbar^2) i^l j_l(p r) \mathcal{Y}_{l s}^{j m_j}(\hat{r}), \quad (4.11)$$

onde j_l são as conhecidas funções de Bessel esféricas. Das equações anteriores temos que a expansão em ondas parciais de T e V em ondas parciais é dada por

$$V(\vec{p}', \vec{p}) = \left(\frac{2\hbar^2}{\pi 2\mu} \right) \sum_{j m_j l' s s'} V_{l' l}^{j(s' s)}(p', p) \mathcal{Y}_{l' s'}^{j m_j}(\hat{p}') \mathcal{Y}_{l s}^{\dagger j m_j}(\hat{p}), \quad (4.12)$$

$$T(\vec{p}', \vec{p}) = \left(\frac{2\hbar^2}{\pi 2m} \right) \sum_{j m_j l' s s'} T_{l' l}^{j(s' s)}(p', p) \mathcal{Y}_{l' s'}^{j m_j}(\hat{p}') \mathcal{Y}_{l s}^{\dagger j m_j}(\hat{p}), \quad (4.13)$$

com

$$\langle p'; l' s' j' m_{j'} | T | p; l s j m_j \rangle = T_{l' l}^{j(s' s)}(p', p) \delta_{j', j} \delta_{m_j, m_{j'}}, \quad (4.14)$$

e

$$\langle p'; l' s' j' m_{j'} | V | p; l s j m_j \rangle = V_{l' l}^{j(s' s)}(p', p) \delta_{j', j} \delta_{m_j, m_{j'}}. \quad (4.15)$$

Lembrando que as funções spin-angulares possuem a seguinte relação de ortogonalidade

$$\int \mathcal{Y}_{l s}^{j m_j}(\hat{p}) \mathcal{Y}_{l' s'}^{\dagger j m_j}(\hat{p}) d\hat{p} = \delta_{l l'} \delta_{s s'} \delta_{m_j, m_{j'}}, \quad (4.16)$$

podemos escrever a equação de Lippmann-Schwinger decomposta em ondas parciais para processos onde o número quântico l não é conservado

$$T_{l' l}^{j(s' s)}(p', p) = V_{l' l}^{j(s' s)}(p', p) + \frac{2}{\pi} \sum_{L S} \int_0^\infty q^2 dq \frac{V_{l' L}^{j(s' S)}(p', q) T_{L l}^{j(S s)}(q, p)}{k^2 - q^2 \pm i0} \quad (4.17)$$

As equações exatas a serem resolvidas em acoplamento tripleto-tripletto, $^1S_3 - ^1D_3$, fica na forma matricial explícita

$$\begin{bmatrix} T_{j-1 j-1}^j \\ T_{j+1 j-1}^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{j-1 j-1}^j \\ V_{j+1 j-1}^j \end{bmatrix} + \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{k^2 - q^2} \begin{bmatrix} V_{j-1 j-1}^j(p', q) & V_{j-1 j+1}^j(p', q) \\ V_{j+1 j-1}^j(p', q) & V_{j+1 j+1}^j(p', q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{j-1 j-1}^j(q, p) \\ T_{j+1 j-1}^j(q, p) \end{bmatrix} \quad (4.18)$$

$$\begin{bmatrix} T_{j+1,j+1}^j \\ T_{j-1,j+1}^j \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} V_{j+1,j+1}^j \\ V_{j-1,j+1}^j \end{bmatrix} + \int_0^\infty \frac{q^2 dp}{k^2 - q^2} \begin{bmatrix} V_{j+1,j+1}^j(p', q) & V_{j+1,j-1}^j(p', q) \\ V_{j-1,j+1}^j(p', q) & V_{j-1,j-1}^j(p', q) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} T_{j+1,j+1}^j(q, p) \\ T_{j-1,j+1}^j(q, p) \end{bmatrix} \quad (4.19)$$

onde temos suprimido a dependência funcional de T e V em alguns termos por motivos de brevidade. As equações (4.18) e (4.19) dão uma idéia da dificuldade de se resolver por métodos convencionais tais como inversão matricial direta, essas equações que são na verdade relativamente simples.

Para nossa utilização a equação de LS que iremos resolver é pouco diferente da equação (3.44) que encontramos no capítulo anterior. Na base $|p; l s j m_j\rangle$ a equação para a matriz- T fica

$$\begin{aligned} \langle p'; l' s' j' m_{j'} | T | p; l s j m_j \rangle &= \langle p'; l' s' j' m_{j'} | V | p; l s j m_j \rangle + \sum_{nl'', ml'''} \sum_{s'' s'''} \langle p'; l' s' j' m_{j'} | V | u_{nl''}^{j(s'')} \rangle \\ &\times D_{nl'', ml'''}^{j(s'', s''')} \langle u_{ml'''}^{j(s''')} | V | p; l s j m_j \rangle, \end{aligned} \quad (4.20)$$

com

$$(D^{-1})_{ml''', nl''}^{j(s', s''')} = \langle u_{ml'''}^{j(s''')} | (k^2 - \mathcal{H}) | u_{nl''}^{j(s'')} \rangle, \quad (4.21)$$

aqui nós definimos

$$\mathcal{H} \equiv 2mH/\hbar^2 = -\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + V(r). \quad (4.22)$$

As funções $u_{nl}^{j(s)}$ na representação aqui adotada são dadas, por

$$\langle \vec{r} | u_{nl}^{j(s)} \rangle = i^l u_{nl}(r) \mathcal{Y}_{ls}^{jm_j}(\hat{r}), \quad (4.23)$$

$$\langle \vec{p} | u_{nl}^{j(s)} \rangle = u_{nl}(r) \mathcal{Y}_{ls}^{jm_j}(\hat{p}), \quad (4.24)$$

na representação das coordenadas e momentos, respectivamente.

4.3 Cálculo dos Elementos de Matriz

Apresentamos nesta seção³ o cálculo dos elementos de matriz para o espalhamento NN utilizando potenciais contendo o acoplamento spin-órbita e um termo tensorial Eq.(4.1). Alguns dos elementos de matriz que aparecem na seção 3.3 também estarão presentes aqui, apesar de estarmos tratando agora de uma interação mais complexa, devido ao fato de o potencial de Reid para o canal ${}^3S_1 - {}^3D_1$ para o preservar a sua forma para os termos centrais V_c , tensoriais V_t e da interação spin-órbita V_{ls} . A presença desses termos no potencial apresentam um cálculo formal bem mais trabalhoso que o realizado na seção do capítulo anterior.

A forma explícita das integrais dos elementos da matriz inversa, Eq.(4.21), para o acoplamento ${}^1S_3 - {}^1D_3$, onde $j = 1$ e $s = 1$, é dada por⁴

$$(D^{-1})_{nl''',ml'''} = \int_0^\infty [ru_{nl'''}] \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \delta_{l''',l'''} - v_{l''',l'''}(r) \right] [ru_{ml'''}] dr, \quad (4.25)$$

onde temos suprimido os índices $j(ss')$ que aparecem na Eq.(4.21) pelo fato de que eles não variam nesse processo.

$$\langle pl | V_{ll'} | u_{nl'} \rangle \equiv \langle u_{nl'} | V_{ll'} | pl \rangle = \int_0^\infty u_{nl'}(r) v_{ll'}(r) j_l(pr) r^2 dr, \quad (4.26)$$

$$V_{ll'}(p, q) \equiv V_{ll'}(q, p) = \int_0^\infty j_l(pr) V(r) j_{l'}(qr) r^2 dr. \quad (4.27)$$

Os elementos de matriz Eq.(4.25), no espaço dos momentos, para um potencial da forma

$$V(r) = v_0 \frac{e^{-\mu r}}{r}. \quad (4.28)$$

Nesse caso a forma explícita das Eqs.(4.21) e (4.27), no espaço dos momentos, que serão utilizadas são para as

³Nos cálculos que se seguem os resultados são dados em termos da unidade $2m/\hbar^2 = 41.47 \text{ MeV } fm^2$

⁴As função que aparecem nesta seção: Q_l e j_l , são as mesmas funções que aparecem na Sec. 3.4.

$$V_{11}(p, q) = \frac{v_0}{2pq} Q_1 \left[\frac{\mu^2 + p^2 + q^2}{2pq} \right], \quad (4.29)$$

$$V_{20}(p, q) \equiv v_{02}(q, p) = -\frac{v_0}{2pq} \left[Q_2 \left(\frac{q + i\mu}{p} \right) + Q_2 \left(\frac{q - i\mu}{p} \right) \right], \quad (4.30)$$

$$\begin{aligned} \langle u_{0l} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \delta_{l,l'} - V_{ll'} \right] | u_{0l'} \rangle &= \delta_{ll'} \left[-\alpha^2(l+1)^2 \sum_{j=0}^{2l} \frac{(-1)^j C_j^{2l}}{(2+j)\alpha - 2ik} \right. \\ &\quad - l(l+1) \sum_{j=0}^{2l+2} (-1)^j C_j^{2l+2} [j\alpha - 2ik] \ln[j\alpha - 2ik] \\ &\quad \left. + v_0 \sum_{j=0}^{l+l'+2} (-1)^j C_j^{l+l'+2} \ln(\mu + j\alpha - 2ik) \right], \quad (4.31) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle u_{nl} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \delta_{l,l'} - V_{ll'} \right] | u_{0l'} \rangle &\equiv \langle u_{0l'} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \delta_{l,l'} - V_{0l'} \right] | u_{nl} \rangle \\ &= -\delta_{ll'} (l+1)! \sum_{j=0}^{l+1} (-1)^j C_j^{l+1} \frac{(n\alpha)^2 + 2\alpha n(\alpha j - ik) - k^2}{[\alpha(n+j) - ik]^{l+2}} \\ &\quad - l! v_0 \sum_{j=0}^{l'+1} (-1)^j C_j^{l'+1} [\mu + \alpha(n+j) - ik]^{-(l+1)}, \quad (4.32) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle u_{nl} | \left[\left(k^2 + \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \delta_{l,l'} - V_{ll'} \right] | u_{ml'} \rangle &= (l+l'+1)! \left[\frac{2(k^2 - nm\alpha^2)(l+1)}{[\alpha(m+n)]^{2l+3}} \delta_{ll'} \right. \\ &\quad \left. - v_0 \frac{1}{[\alpha(n+m) + \mu]^{l+l'+2}} \right], \quad (4.33) \end{aligned}$$

$$\langle pl | V_{11} | u_{nl} \rangle = v_0 \frac{p^l (\sqrt{2})^{l(l+1)}}{[p^2 + \{\mu + \alpha n\}^2]^{l+1}}, \quad (4.34)$$

$$\langle p0 | V_{02} | u_{n2} \rangle = 2v_0 \frac{3[\alpha n + \mu]^2 - p^2}{[p^2 + \{\mu + \alpha n\}^2]^3}, \quad (4.35)$$

$$\langle p2 | V_{20} | u_{n0} \rangle = \frac{v_0}{p^2} \left[\frac{2p^2 + 3[\mu + \alpha n]^2}{p^2 + [\mu + \alpha n]^2} - \frac{3[\mu + \alpha n]}{p} \arctan \left(\frac{p}{\mu + \alpha n} \right) \right], \quad (4.36)$$

$$\langle pl|V_{ll'}|u_{0l'}\rangle = \frac{i^{l+1}v_0}{p} \sum_{j=0}^{l'+1} (-1)^j C_j^{l'+1} Q_l \left[\frac{k + i(\mu + \alpha j)}{p} \right]. \quad (4.37)$$

As partes angulares das integrais Eqs.(4.26-4.34) para um potencial na forma dada pela Eq.(4.1):

$$V = V_c(r) + V_t(r)S_{12} + V_{ls}(r)\vec{L} \cdot \vec{S} \quad (4.38)$$

onde as partes centrais $V_c(r)$, $V_t(r)$, $V_{ls}(r)$ são da forma da Eq.(4.25), são dadas abaixo:

$$\langle \mathcal{Y}_{01}^{11} | S_{12} | \mathcal{Y}_{21}^{11} \rangle = \sqrt{8}, \quad (4.39)$$

neste caso $l = 0$, $l' = 2$ não temos a contribuição da interação spin-órbita. Quando $l = l' = 2$, a parte tensorial contribui com um fator dado por

$$\langle \mathcal{Y}_{21}^{11} | S_{12} | \mathcal{Y}_{21}^{11} \rangle = -3, \quad (4.40)$$

e o acoplamento spin-órbita contribui, respectivamente, com

$$\langle \mathcal{Y}_{21}^{11} | \vec{L} \cdot \vec{S} | \mathcal{Y}_{21}^{11} \rangle = -2. \quad (4.41)$$

Com os elementos calculados acima podemos escrever o potencial para cada canal com seus respectivos fatores dados pelas Eq. (4.39)-(4.41), tal que, para $l = l' = 0$

$$V_{00} = V_c(r), \quad (4.42)$$

já que para esse canal não há contribuição dos termos $\vec{L} \cdot \vec{S}$ nem de S_{12} . Quando $l = 0$ e $l' = 0$, temos

$$V_{02} \equiv V_{20} = \sqrt{8}V_t(r). \quad (4.43)$$

Analogamente, quando $l = l' = 2$,

$$V_{22}(r) = V_c(r) - 2V_t(r) - 3V_{ls}(r). \quad (4.44)$$

4.4 Estado Ligado

Podemos estender a formulação desenvolvida para o princípio variacional de Kohn complexo para estados de energia negativa com simples modificações. Devido ao fato desse princípio variacional não possuir as anomalias que aparecem no princípio variacional de Kohn real é possível calcular, além das quantidades características de espalhamento, também estados de energia negativa. Obviamente é mais simples resolver o problema de estado ligado aplicando o método variacional diretamente a equação diferencial de Schrödinger. Aqui dois aspectos devem ser ressaltados; o primeiro é que, por este método de solução, tratamos igualmente bem o problema de espalhamento e de estado ligado, não necessitando recorrer a outro método para energias negativas. O segundo aspecto, já mencionado, é que o fato de conseguirmos obter energias de ligação por esse método variacional sem encontrar as conhecidas "patologias" que são comuns no princípio variacional de Kohn real representa outra vantagem do princípio variacional de Kohn complexo.

Na Sec.(3.2), do capítulo anterior, encontramos uma expansão para a função de Green dada por

$$[G^{(+)}(E)]_N = \sum_{n,m=0}^N |u_n\rangle D_{nm} \langle v_m|, \quad (4.45)$$

e

$$(D^{-1})_{nm} = \langle v_m|(E - H)|u_n\rangle, \quad (4.46)$$

com $n, m=0,1,\dots,N$.

O problema de se encontrar a energia de ligação para o sistema NN , consiste em se encontrar o pólo da matriz- T na região $E < 0$ (eixo real). Assim, devemos ter, quando $E = E_B$ um pólo na Eq.(4.45). Portanto com a simples modificação nos elementos de matriz que aparecem na Sec.(4.3), fazendo $k = ik'$, encontramos que, quando

$$\text{Det}[\langle u_n|(E' - H)|u_n\rangle] = 0, \quad (4.47)$$

teremos $E' = E_B$.

4.5 Resultados

Na aplicação do princípio variacional de Kohn complexo ao espalhamento e estado ligado de dois nucleons em um problema realístico utilizamos um potencial de forma simples mais que contém termos fenomenológicos tais como a interação tensorial e spin-órbita[25]⁵. A simplificação do potencial de Reid(RSC)[22], dada por Pieper(SRSC)[30], possibilita-nos utilizando um conjunto de funções simples, tais como as dadas nas Eqs.(4.48-4.49):

$$u_{0l}(r) = (1 - e^{\alpha r})^{l+1} \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (4.48)$$

$$u_{nl}(r) = r^l e^{-\alpha nr}, \quad (4.49)$$

nós obtemos elementos da *matriz-T* cuja, forma no espaço dos momentos é analítica. Isso faz com que não haja necessidade de integração numérica para a obtenção desses elementos. O potencial de Pieper(SRSC) é definido por

$$V_c(r) = (-10.463e^{-\mu r} + 105.468e^{-2\mu r} - 3187.8e^{-4\mu r} + 9924.3e^{-6\mu r})/\mu r, \quad (4.50)$$

$$V_t(r) = (-18.5488e^{-\mu r} - 109.307e^{-2\mu r} + 210.503e^{-4\mu r} - 1650.35e^{-6\mu r})/\mu r, \quad (4.51)$$

$$V_{is}(r) = (708.91e^{-4\mu r} - 2713.1e^{-6\mu r})/\mu r, \quad (4.52)$$

onde a unidade de $V(r)$ é dada em MeV, e $\mu \equiv mc/\hbar = 0.7fm^{-1}$. Através dos elementos de matriz dados na seção anterior efetuamos os cálculos dos deslocamentos de fase, via princípio variacional de Kohn complexo. Entretanto lembramos que os elementos da *matriz-T* não satisfazem o vínculo de unitariedade devido ao fato de no cálculo dos elementos de matriz não utilizarmos o complexo conjugado da função $\langle r|u_{0l}\rangle$. Deste modo, os deslocamentos de fase, que para potencias reais devem ser também reais, são agora complexos. Deste modo definimos a parte real do deslocamento de fase para o acoplamento ${}^1S_3 - {}^1D_3$ por

⁵Os principais resultados dessa seção estão presentes nessa referência.

$$\delta_R = \frac{1}{2} \arctan \frac{\text{Im}(S)}{\text{Re}(S)}. \quad (4.53)$$

que será a definição do deslocamento de fase para o método variacional aqui aplicado. Onde a matriz- S é dada por

$$S = \begin{pmatrix} \cos 2\epsilon_1 e^{2i\delta_{j-1}} & i \sin 2\epsilon_1 e^{i(\delta_{j+1} + \delta_{j-1})} \\ i \sin 2\epsilon_1 e^{i(\delta_{j+1} + \delta_{j-1})} & \cos 2\epsilon_1 e^{2i\delta_{j+1}} \end{pmatrix} \quad (4.54)$$

que é a parametrização da matriz- S dada por Stapp et al.[33] cujo deslocamento de fase é historicamente conhecido como “nuclear bar phase-shifts”. Na equação (4.54) o parâmetro ϵ_1 é o parâmetro de mistura. Na tabela (4.1) nós apresentamos os deslocamentos de fase e os parâmetros de mistura obtidos. Lembramos contudo que o valor N apresentado na tabela (4.1) representa, ao contrário da seção anterior, uma matriz $(D^{-1})_{nl,ml}$ de dimensão $2N$. Da tabela 4.1 observa-se a rápida convergência dos resultados nas diversas energias. Analogamente ao que fizemos no cálculo dos deslocamentos de fase para os potenciais centrais, aqui também comparamos os nossos resultados com os resultados obtidos por outros métodos tais como: método exato[22], métodos iterativos[16] ou variacionais[36]. Obtemos também os resultados para o comprimento de espalhamento $a_{np} = -5.386 \text{ fm}$ que está em boa concordância o valor dado por Pieper(-5.39 fm)[30]. Uma apreciação mais geral da convergência do método variacional de Kohn complexo pode ser vista nas figuras. Nessas figuras, 4.5-4.8, apresentamos a matriz- T totalmente fora da camada de energia (“off-shell”)(4.25).

Através de uma alteração simples, fazendo $k = ik_B$, o zero do determinante da matriz corresponde a energia de ligação do sistema NN , para o caso em específico encontramos $E_B = 2.2298$ que é exatamente o valor dado por Pieper. A razão assintótica entre o estado D e S , existente na função de onda do dêuteron, definido por

$$\eta_D = \lim_{k \rightarrow ik_B} \frac{T_{02}}{T_{00}}, \quad (4.55)$$

foi calculada com boa precisão: $\eta_D = 0.02634$. Essa quantidade é de grande interesse já que pode ser medida experimentalmente. Praticamente independente do potencial essa

quantidade constitui-se de uma boa medida sobre a mistura de ondas D e S no dêuteron.

4.6 Resumo e Conclusão

Apresentamos neste capítulo o p. v. de Kohn complexo como uma alternativa para a solução da equação de Lippmann-Schwinger[6] para estados ligados e estados do contínuo. Abordamos, especificamente o problema da solução da equação integral original, utilizando um potencial fenomenológico para o espalhamento NN , com interação tensorial e spin-órbita, para o canal ${}^3S_1 - {}^3D_1$ onde ocorre o estado ligado do dêuteron. Mostramos que os deslocamentos de fase e a *matriz-T* fora da camada de energia não apresentam anomalias ou quaisquer outras patologias que aparecem com frequência no princípio variacional de Kohn real [7] ou mesmo no princípio variacional de Schwinger[35].⁶ A convergência dos resultados foram muito boas comparado-se com outros resultados obtidos utilizando-se o método variacional de Schwinger[36]. Mesmo com o acoplamento devido ao potencial tensorial que aumenta a dimensão da matriz $D_{n,m}^{-1}$ a ser invertida, da comparação entre os resultados obtidos para os casos sem acoplamento e o caso acoplado percebemos que a convergência foi comparável não causando o acoplamento consequências desagradáveis. Nota-se, analogamente ao que observamos nas ondas parciais $l = 0$, $l = 1$ e $l = 2$, que a medida que aumentamos a energia há a necessidade de variarmos o parâmetro variacional para obtermos um resultado mais preciso em relação a outras energias. Contudo, fizemos todos os cálculos utilizando um parâmetro fixo $\alpha = 1.15 fm^{-1}$ que foi obtido pela estabilidade da solução numérica. As equações para o problema do espalhamento são facilmente estendidas para calcular também o estado ligado do dêuteron e as funções de onda.

⁶ Acreditava-se que o princípio variacional de Schwinger estivesse “livre” de singularidades espúrias e que esta característica fosse inerente ao princípio variacional de Kohn real. Neste artigo os autores sustentam que uma pobre escolha das funções variacionais podem levar o princípio variacional de Schwinger a apresentar anomalias.

$E_{cm} =$	Canais	$N=2$	$N=4$	$N=6$	$N=8$	$N=10$	Reid
12	$\delta(^3S_1)$	0.8131	1.3450	1.4217	1.4262	1.4262	1.426
	$\delta(^3D_1)$	-0.0686	-0.0510	-0.0504	-0.0501	-0.0501	-0.050
	(ϵ_1)	0.1192	0.0403	0.0328	0.0318	0.0318	0.032
24	$\delta(^3S_1)$	2.2281	1.04341	1.1011	1.1055	1.1055	1.105
	$\delta(^3D_1)$	-0.1538	-0.1160	-0.1147	-0.1146	-0.1147	-0.115
	(ϵ_1)	0.1315	0.0511	0.0422	0.0413	0.0414	0.0405
48	$\delta(^3S_1)$	0.4346	0.6990	0.7438	0.7485	0.7485	0.749
	$\delta(^3D_1)$	-0.2622	-0.2215	-0.2150	-0.2153	-0.2150	-0.215
	(ϵ_1)	0.1104	0.0729	0.0583	0.0584	0.0583	0.057
72	$\delta(^3S_1)$	0.3045	0.4697	0.5157	0.5199	0.5200	0.521
	$\delta(^3D_1)$	-0.3160	-0.2988	-0.2814	-0.2815	-0.2810	-0.281
	(ϵ_1)	0.0729	0.0988	0.0764	0.0768	0.0765	0.076
104	$(\delta(^3S_1))$	0.2415	0.2417	0.2962	0.2990	0.2990	0.300
	$\delta(^3D_1)$	-0.3431	-0.3700	-0.3406	-0.3412	-0.3413	-0.340
	(ϵ_1)	0.0133	0.1296	0.1005	0.1017	0.1018	0.010
152	$\delta(^3S_1)$	0.2281	-0.0129	0.0533	0.0552	0.0553	0.057
	$\delta(^3D_1)$	-0.3649	-0.4472	-0.4078	-0.4061	-0.4058	-0.403
	(ϵ_1)	0.0630	0.1620	0.1336	0.1353	0.1356	0.136
176	$\delta(^3S_1)$	0.2083	-0.1151	-0.0465	-0.0437	-0.0437	-0.042
	$\delta(^3D_1)$	-0.3717	-0.4815	-0.4390	-0.4344	-0.4338	-0.431
	(ϵ_1)	-0.0939	0.1723	0.1481	0.1492	0.1494	0.150

Tabela 4.1: Deslocamentos de fase e parâmetros de mistura para o potencial de Reid(RSC).

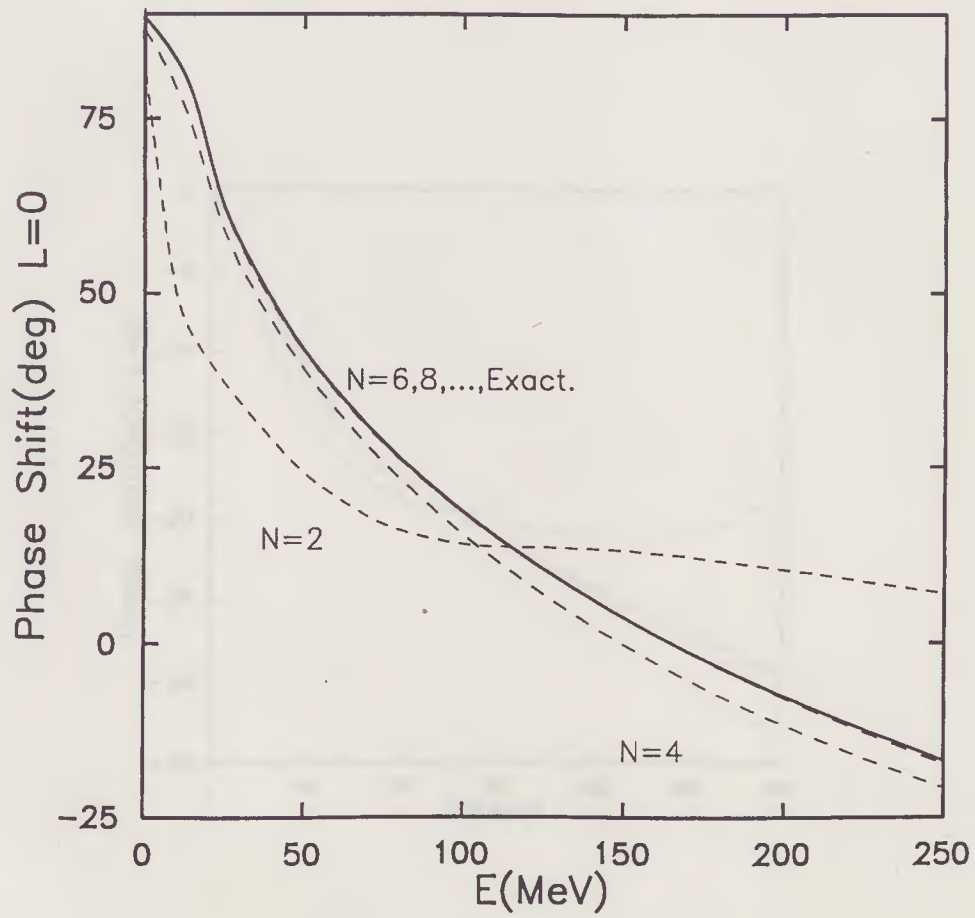


Figura 4.1: Deslocamento de fase δ (3S_1). Mostramos aqui graficamente os mesmos resultados da tabela 4.1.

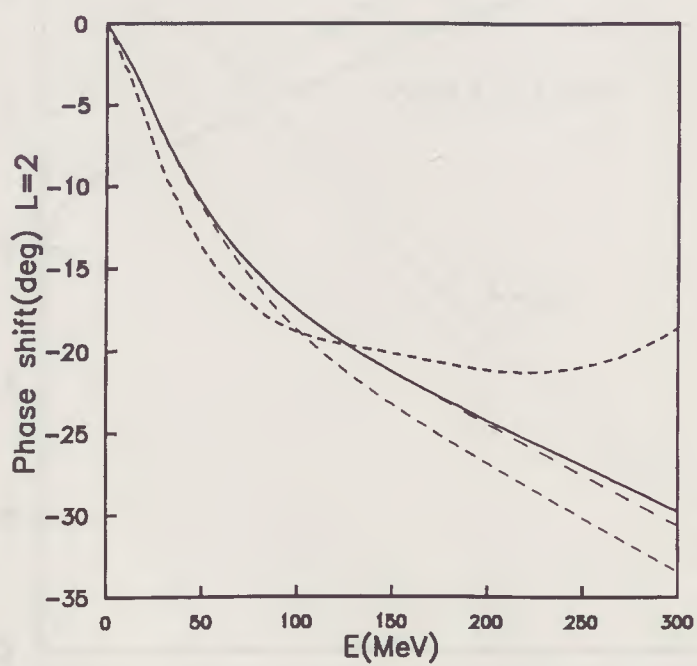


Figura 4.2: Deslocamentos de fase para $\delta(^3D_1)$.

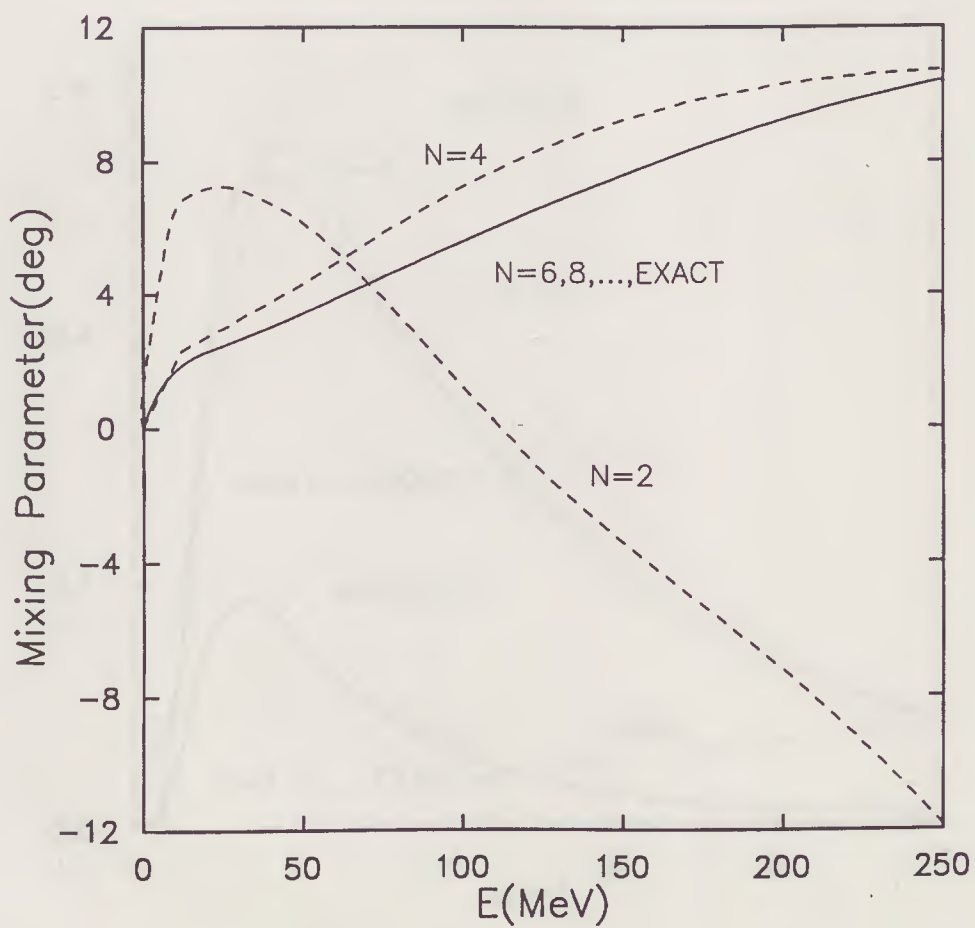


Figura 4.3: Parâmetro de mistura ϵ_1 .

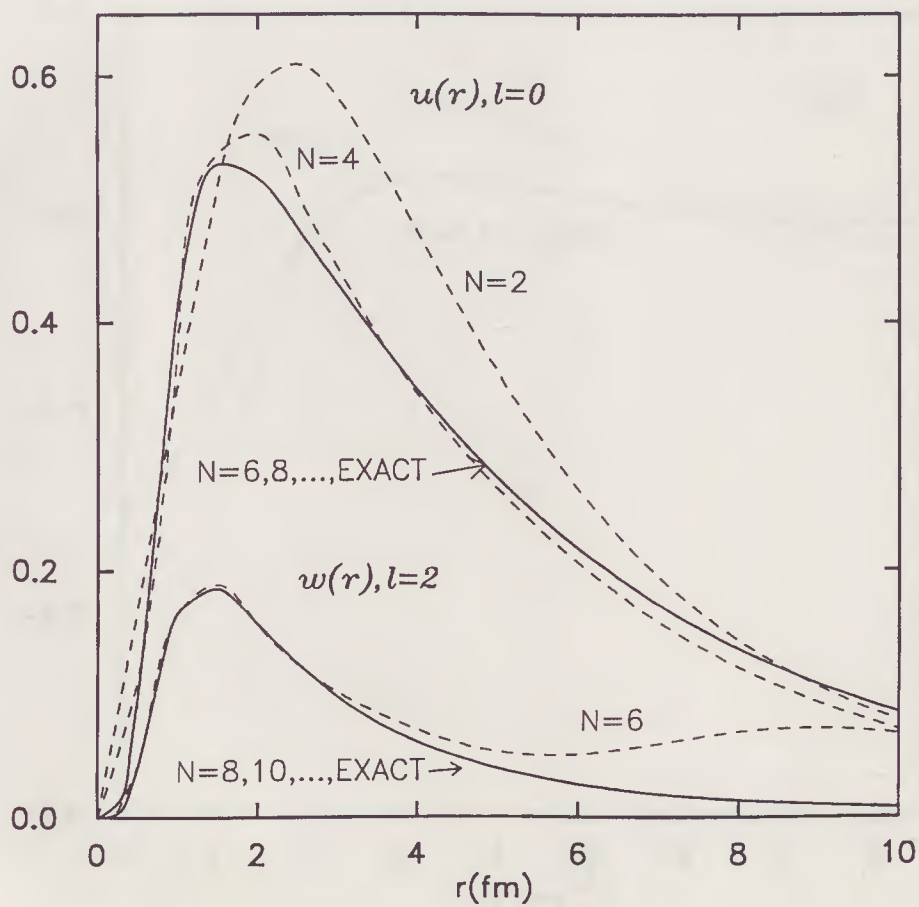


Figura 4.4: Funções de onda normalizadas do Dêuteron

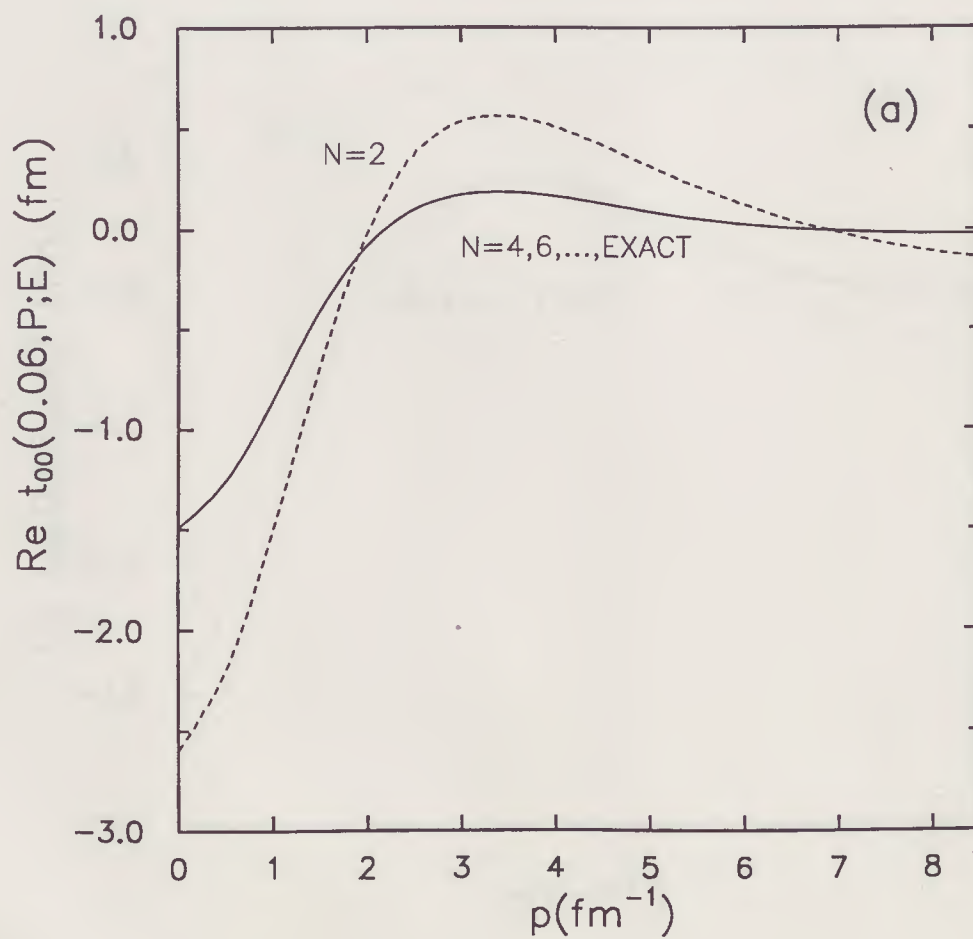


Figura 4.5: Plotamos a parte real da matriz $T_{00}(0.06 \text{ fm}^{-1}, p)$ fora da camada de energia, $E = 48 \text{ MeV}$.

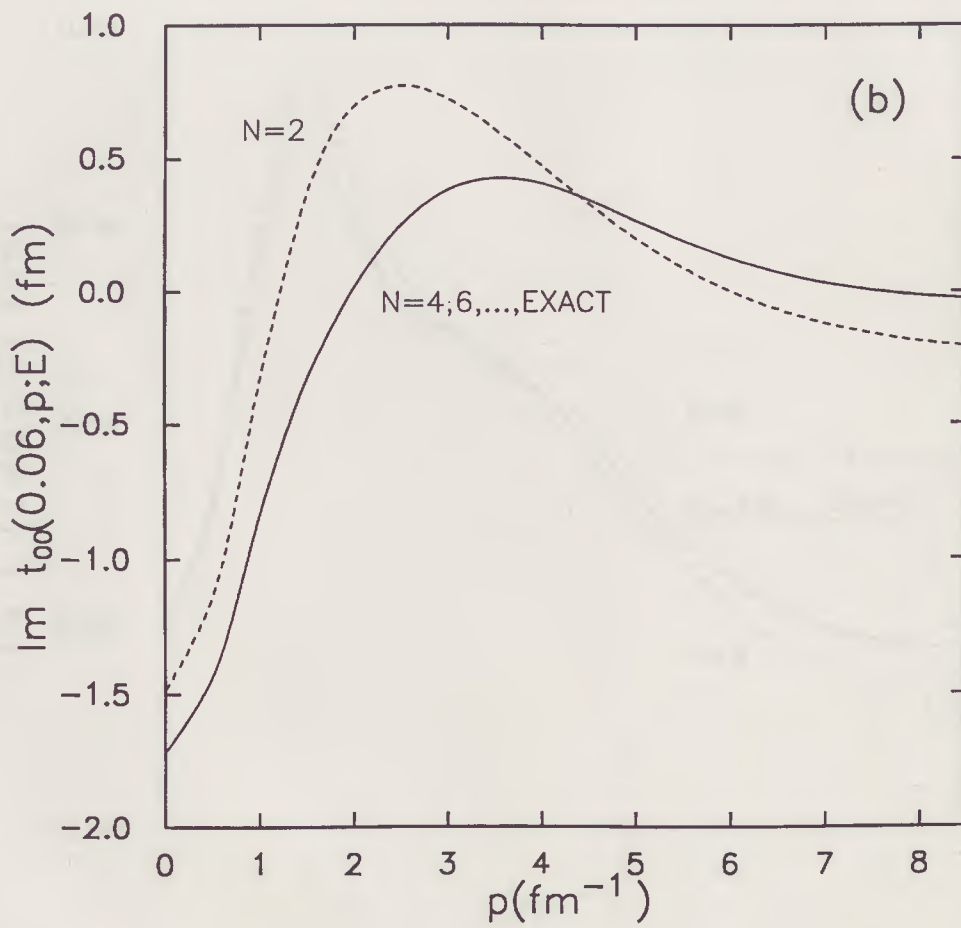


Figura 4.6: Parte imaginária da matriz $T_{00}(0.06 \text{ fm}^{-1}, p)$ para as mesmas energias da figura anterior, $E = 48 \text{ MeV}$.

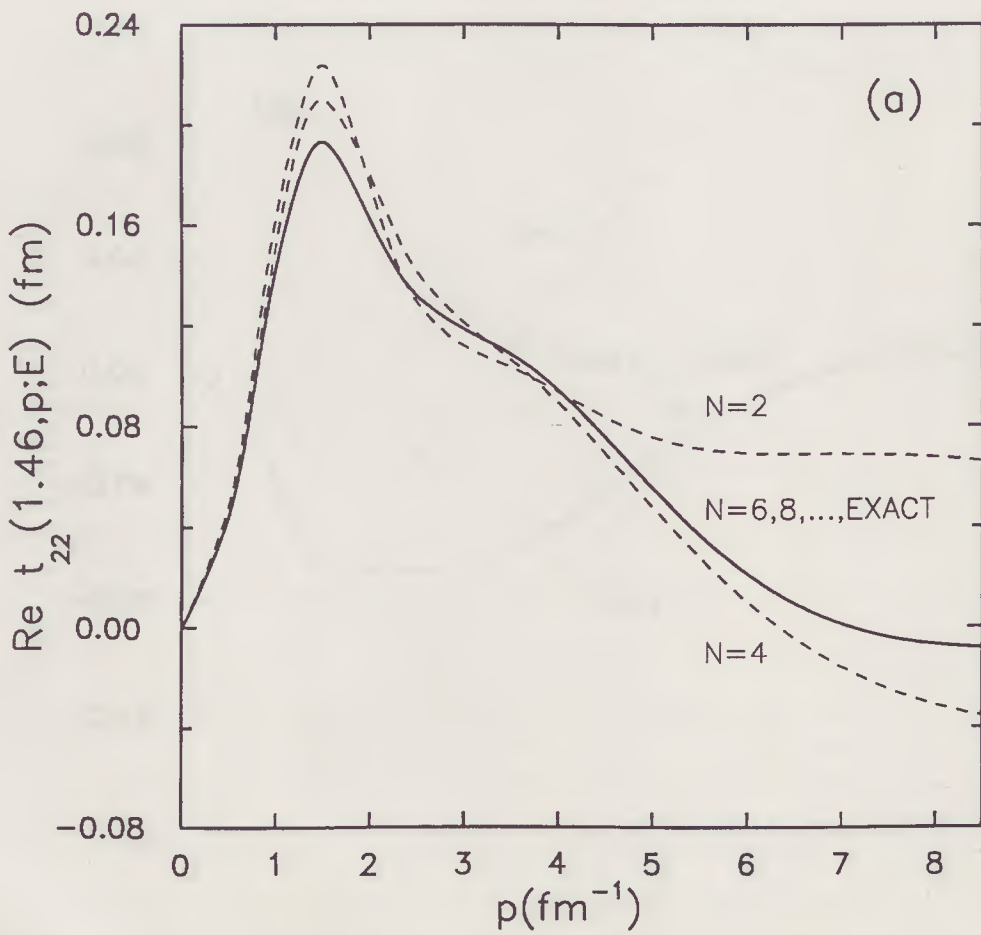


Figura 4.7: Parte real da matriz $T_{22}(1.46 \text{ fm}^{-1}, p)$ "of-shell" para o acoplamento ${}^3S^1 - D_1^3$, $E = 100 \text{ MeV}$.

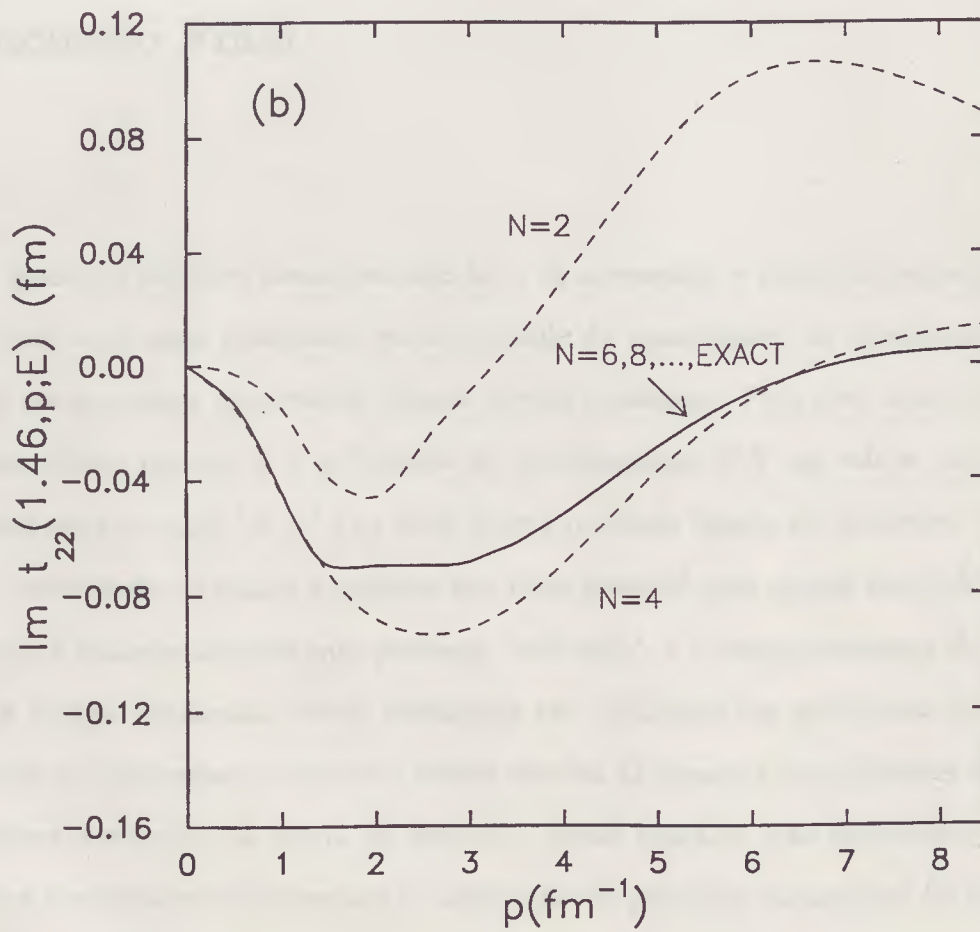


Figura 4.8: Parte imaginária da matriz $T_{22}(1.46 \text{ fm}^{-1}, p)$, figura anterior, $E = 100 \text{ MeV}$.

Capítulo 5

Conclusão Final

O principal objetivo desse trabalho foi o de apresentar o princípio variacional de Kohn complexo como uma alternativa para o cálculo de quantidades de espalhamento e estado-ligado em processos envolvendo poucos corpos nucleares. Para isso desenvolvemos o formalismo desse método e o aplicamos no espalhamento NN em várias ondas parciais e também para o canal ${}^3S_1 - {}^3D_1$, onde ocorre o estado ligado do dêuteron. Acreditava-se que o tratamento de canais acoplados não fosse possível para canais acoplados. Utilizamos potenciais fenomenológicos que possuem “soft-core” e o comportamento de troca de um pion a longas distâncias. Esses potenciais são utilizados em problemas reais de poucos nucleons e o tratamento numérico desses conduz às mesmas complicações dos potenciais realísticos derivados da teoria de mésons. Neste trabalho não encontramos as anomalias que frequentemente ocorriam na aplicação do princípio variacional de Kohn real tais como singularidades espúrias ou pseudo-ressonâncias. A convergência mostrou-se superior a outros métodos variacionais como o princípio variacional de Schwinger[36] e o princípio variacional de Kohn real[19]. O presente método conduz a matrizes de dimensões menores a serem invertidas. A extensão para o caso de energias negativas(estado-ligado) é direta e simples, como foi mostrado, conduzindo ao valor correto da energia de ligação do dêuteron, $E_B = 2.2298 \text{ MeV}$, usando o potencial de Reid-Pieper[30]. Portanto, a partir de um só procedimento podemos calcular quantidades de espalhamento e estado-ligado. A extensão do método para estados virtuais e ressonâncias pode ser feita sem maiores dificuldades.

Além das quantidades acima, calculamos também a razão assintótica entre os estados de onda D e S , η_D , que é experimentalmente conhecida e foi reproduzida com 4 dígitos de precisão: $\eta_D = 0.02634$. O parâmetro de mistura ϵ_1 foi calculado, em diversas energias, utilizando-se a parametrização para a matriz- S dada por Stapp, Ypsilantis e Metropolis[33]. A unitariedade da matriz- T também não é comprometida o que se pode ver dos resultados convergidos que obtivemos para a matriz- T fora da camada de energia, figuras 4.5-4.8, e nos deslocamentos de fase obtidos, tabelas 3.1, 3.2, 3.3 e 4.1. Apesar de se mostrar um método bastante prático, conduzindo a uma quantidade de cálculo inferior a outros métodos, utiliza-se de inversão matricial o que reduz a precisão dos resultados quando as matrizes torna-se grandes. Para cálculos de grande precisão os métodos iterativos via equações auxiliares, que se utiliza apenas de multiplicações matriciais, parecem ser mais apropriados[16]. Uma possível aplicação futura do princípio variacional de Kohn complexo poderá ser feita em problemas de três corpos nucleares utilizando-se potenciais realísticos. Esse método poderá também ser aplicado na solução da equações relativísticas como a equação de Bethe-Salpeter[37].

Apêndice A

Definição das funções $P_l(z)$ e $Q_l(z)$

Os polinômios de Hermite $P_l(z)$ e as funções associadas de Legendre $Q_l(z)$ são definidas por

$$P_l(z) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (z^2 - 1)^l}{dz^l},$$
$$Q_l(z) = \frac{1}{2} P_l(z) \ln\left(\frac{z+1}{z-1}\right) - W_{l-1}(z)$$

respectivamente. As funções W_{l-1} são dadas por

$$W_{l-1}(z) = \sum_{m=1}^l \frac{1}{m} P_{m-1}(z) P_{l-m}(z),$$
$$W_{-1}(z) = 0.$$

No presente trabalho utilizamos apenas as funções acima para $l = 0, 1, 2$, que são dadas por

$$P_0(z) = 1,$$
$$P_1(z) = z,$$
$$P_2(z) = \frac{1}{2}(3z^2 - 1).$$

Com a seguinte fórmula de recorrência

$$P_l(z) = \frac{(2l-1)zP_{l-1}(z) - (l-1)P_{l-2}(z)}{l}, \quad (\text{A.1})$$

podemos facilmente encontrar as funções $Q_l(z)$.

Relação das Figuras

3.1	Deslocamento de fase δ (1S_0)	41
3.2	Deslocamentos de fase; δ (1P_1) e δ (1D_2)	42
3.3	Função de Kowalski-Noyes para $l = 0$	43
3.4	Função de Kowalski-Noyes para $l = 1$	44
3.5	Função de Kowalski-Noyes para $l = 2$	45
4.1	Deslocamento de fase δ (3S_1).	59
4.2	Deslocamentos de fase para δ (3D_1).	60
4.3	Parâmetro de mistura ϵ_1	61
4.4	Funções de onda normalizadas do Dêuteron	62
4.5	Parte real da matriz T_{00}	63
4.6	Parte imaginária da matriz T_{00}	64
4.7	Parte real da matriz T_{22}	65
4.8	Parte imaginária da matriz T_{22}	66

Relação das Tabelas

3.1	Deslocamentos de fase $\delta(^1S_0)$	40
3.2	Deslocamentos de fase $\delta(^1P_1)$	40
3.3	Deslocamentos de fase $\delta(^1D_2)$	40
4.1	Deslocamentos de fase $\delta(^3S_1), \delta(^3D_1)$ e parâmetro de mistura ϵ_1	58

Referências Bibliográficas

- [1] Para uma revisão bastante estensa dos princípios variacionais em teoria de espalhamento e estado ligado ver: J. Callaway, Phys. Rep. 45, 89 (1978); M.A. Abdel-Rauof, ibid. 84, 163 (1982); 108,1(1984); R.R. Lucchese, K. Takatsuka e V. Mackoy, ibid. 131, 147 (1986); R.K. Nesbet, Adv. At. Mol. Phys. 13, 315 (1979).
- [2] L. Hulthén, Kgl. Fysiograf. Sällskap Lund Förh. 14, 257 (1944); L. Hulthén e P. Olsson Phys. Rev. 79, 532 (1950). L. Hulthén e S. Kavlen, Phys. Rev. 87, 297 (1952).
- [3] W. Kohn, Phys. Rev. 74, 1763 (1948).
- [4] S.S. Huang, Phys. Rev. 75, 980 (1948).
- [5] H. Feshbach e S.I. Rubnov, Phys. Rev. 88, 484 (1952). S.I. Rubnov, Phys. Rev. 96, 218 (1954). S.I. Rubnov, Phys. Rev. 98, 183 (1955).
- [6] J. Schwinger, Phys. Rev. 72, 742 (1947); B.A. Lippmann e J. Schwinger, Phys. Rev. 79, 469 (1950); ibid. 79, 481 (1950). Neste primeiro artigo(1947) Schwinger apresenta o princípio variacional para a integral de espalhamento. Depois dos dois artigos com Lippmann a equação integral de espalhamento ficou conhecida como equação de Lippmann-Schwinger.
- [7] C. Schwartz, Ann. Phys. 16, 36(1961), Phys.Rev. 124, 1468(1961).
- [8] Para referências completas ver: R.K. Nesbet, *Variational Methods in Electron-Atom Scattering Theory*, Plenum(New York) (1980).
- [9] R.R. Lucchese, Phys. Rev. A 40, 6879 (1989).

- [10] S.K. Adhikari, Chem. Phys. Lett. 189, 340 (1992).
- [11] F.W. Byron e R.W. Fuller, *Mathematics of Classical and Quantum Physics*, vol. 2, Add. Wesley.
- [12] J.J Sakurai, *Advanced Quantum Mechanics*, Add. Wesley (1967).
- [13] Y. Yukawa, Proc. Phys.-Math. Soc. Japan, 17, 48 (1935).
- [14] S. Weinberg, Phys. Rev. 130, 776 (1963).
- [15] S. Weinberg, Phys. Rev. 131, 440 (1963).
- [16] L. Tomio S.K. Adhikari, Phys. Rev. C 22, 28 (1980); *ibid.* C 24, 43 (1981).
- [17] S. Okubo e R.E. Marshak, Ann. Phys. 4, 166 (1958).
- [18] E. Gerjuoy, A.R. Rau e L. Spruch, Rev. Mod. Phys. 55, 725 (1983).
- [19] S.K. Adhikari e L. Tomio, Phys. Rev. C 36, 1275 (1987).
- [20] Y. Yamaguchi, Phys. Rev. 95, 1635 (1954). F. Tabakin, Ann. Phys. 30, 51 (1964). T.R. Mongan, Phys. Rev. 175, 1260; 178, 1587 (1968). A utilização de potenciais separáveis é uma prática comum em Física. Damos aqui algumas referências históricas sobre as primeiras formas e aplicações de alguns potenciais separáveis.
- [21] S.K. Adhikari e I.H. Sloan, Phys. Rev. C 11, 1133 (1975).
- [22] R.V. Reid Jr., Ann. Phys. (N.Y.) 50, 411 (1968).
- [23] W.H. Miller e B.M.D.D. Jansen op de Haar, J. Chem. Phys. 86, 6213 (1987).
- [24] S.K. Adhikari, Jor. Comp. Phys. 103, 415 (1992).
- [25] Carlos F. de Araujo Jr., S.K. Adhikari e L. Tomio, *Complex Kohn Variational Principle for Two-Nucleon Bound-State and Scattering with the Tensor Potential* (submetido a publicação).

- [26] K. Takatsuka e V. Mackoy, Phys. Rev. A23, 2352 (1981).
- [27] K.L. Kowalski, Nucl. Phys. Rev. A190, 645 (1972); H.P. Noyes, ibid. 15, 538 (1965).
- [28] S.K. Adhikari, Phys. Rev. C11, 1113 (1975).
- [29] D. Blaszczak e M.G. Fuda, Phys. Rev. C8, 1665 (1973).
- [30] S.C. Pieper, Phys. Rev. C9, 883 (1974).
- [31] J. Haidenbauer e K. Holinde, Phys. Rev. C40, 2465 (1979).
- [32] M. Lacombe, B. Loiseau, J.M. Richard, R. Vinh Mau, J. Côté, P. Pirès e R. de Turreil, Phys. Rev. C21, 861 (1980).
- [33] H.P. Stapp, T. Ypsilantis e N. Metropolis, Phys. Rev. 105, 302 (1957).
- [34] S.K. Adhikari e I.H. Sloan, Nucl. Phys. A251, 297 (1975).
- [35] B.A. Apagyi, P. Lévy e W. Plessas, Phys. Rev. A37, 4577 (1988).
- [36] S.K. Adhikari e I.H. Sloan, Nucl. Phys. A251, 297 (1975).
- [37] H.A. Bethe e E.E. Salpeter, Phys. Rev. 84, 1232 (1951).
- [38] Roger G. Newton, *Scattering Theory of Waves and Particles*, Springer(New York).

