

Ref. 25

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO
FACULTAD DE CIENCIAS

LAS CORRECCIONES POR LLENAMIENTO Y DE MASA EFECTIVA

EN LA FORMULA DE MASAS NUCLEARES

TESIS QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
LICENCIADO EN FISICA PRESENTA

JOSE VALENTE HERNANDEZ OCHOA



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas Tesis Digitales Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS © PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

INDICE

CAPITULO 1. INTRODUCCION.....	(1)
CAPITULO 2. SISTEMATICA DE LAS MASAS NUCLEARES.....	(3)
2.1) Antecedentes.....	(3)
2.2) Estructura del núcleo.....	(4)
2.3) Fuerzas nucleares.....	(5)
2.4) Radio nuclear.....	(6)
2.5) Estabilidad nuclear.....	(7)
2.6) Masas nucleares y energía de amarre.....	(9)
2.7) Modelo de la gota de líquido.....	(10)
CAPITULO 3. ESTRUCTURA NUCLEAR DE CAPAS.....	(13)
3.1) Modelo de capas.....	(14)
3.2) Método de Hartree - Fock.....	(18)
3.3) Aproximación de masa efectiva.....	(22)
CAPITULO 4. FORMULA DE MASAS NUCLEARES.....	(31)
4.1) Niveles de energía de partícula independiente.....	(33)
4.2) Fórmula de masas nucleares.....	(36)
CAPITULO 5. CORRECCIONES POR LLENAMIENTO Y DE MASA EFECTIVA..	(41)
5.1) Energía de la última capa.....	(43)
5.2) Cálculo y resultados.....	(46)
5.3) Discusión.....	(54)
5.4) Conclusiones.....	(59)
BIBLIOGRAFIA.....	(61)

CAPITULO 1

INTRODUCCION

Hasta el momento no existe una teoría nuclear completa, es decir, una teoría que unifique las diferentes características del núcleo; es por esto que se han desarrollado diferentes modelos del núcleo (modelo de la gota de líquido, modelo de capas, etc.) resaltando, cada uno, los diferentes aspectos del mismo. En este sentido, las fórmulas de masas nucleares constituyen valiosas herramientas para determinar la validez y las limitaciones de los modelos, así como las diversas propuestas para las interacciones nucleares; también sirven de guía en la búsqueda de nuevos sistemas nucleares creados artificialmente en el laboratorio.

La primera de las fórmulas de masas nucleares de importancia fue obtenida por von Weizsacker (1935) y Bethe y Bacher (1936) quienes explotaron la analogía existente entre ciertas características del núcleo y una gota de líquido. Esta fórmula fue un gran éxito ya que consiguió ajustar las masas nucleares con un error del orden de un 1% y además, de la información que esta desviación proporciona, se infieren algunas otras características importantes del núcleo como, por ejemplo, la estructura de capas del núcleo análoga a la de capas de electrones en el caso atómico.

Para determinar las energías de amarre, se puede tomar como base la teoría de muchos cuerpos en la que, a partir de las interacciones nucleón - nucleón y mediante cálculos autoconsistentes, se obtiene un potencial promedio que permite considerar a los nucleones como partículas independientes bajo la acción de éste. Una vez que se ha encontrado el potencial promedio, se determinan los niveles de energía de partícula independiente, con lo que a su vez se puede obtener la energía de amarre del núcleo. Ahora bien, a pesar de lo anterior, los cálculos autoconsistentes son complejos y no proporcionan una fórmula analítica para la energía de amarre.

En 1979, en su tesis doctoral ([He 79]), Herrera desarrolló una fórmula de masas nucleares basada en un planteamiento de Bauer y Canuto, que parte del modelo de capas. Esto se hizo sustituyendo el potencial autoconsistente por un potencial fenomenológico y a partir de este, obtuvo una expresión analítica para los niveles de energía con la que, sumando adecuadamente, se obtiene una fórmula para la energía de amarre, con una estructura análoga a la de Bethe - Weizsacker.

Para desarrollar esta fórmula de masas no se tomaron en cuenta la posible deformación del campo autoconsistente, el detalle de llenamiento de la última capa y la variación de la masa efectiva en esta.

Posteriormente, Rosales Macedo ([Ro 84]) en su tesis de licenciatura obtuvo algunas expresiones para la corrección por deformación.

El propósito del presente trabajo es incorporar la corrección por llenamiento parcial de la última capa y la corrección de masa efectiva a la fórmula de masas de Herrera.

Este trabajo está constituido por cinco capítulos (incluyendo el presente). En el segundo capítulo se presentan los elementos de la sistemática de las masas nucleares, se discute el modelo de la gota de líquido y la fórmula de masas de Bethe - Weizsacker. En el capítulo tercero se trata el modelo de capas, el método de Hartree - Fock y la aproximación de masa efectiva. En el cuarto capítulo se describe brevemente el planteamiento fenomenológico para el cálculo de la energía de amarre desarrollado por Herrera y Bauer. Finalmente, en el quinto capítulo, se obtienen y evalúan la corrección por llenamiento y la corrección de masa efectiva.

CAPITULO 2.

SISTEMATICA DE LAS MASAS NUCLEARES

En este capítulo se describen los elementos básicos de la sistemática de las masas nucleares. Para esto, primero se presentan a grosso modo, los hechos que condujeron al descubrimiento del núcleo atómico y al conocimiento de su estructura. Posteriormente se proporcionan algunas definiciones importantes y se presentan algunas características del mismo (carga, masa, etc.). Por último, se definen la energía de amarre, la energía de separación y además, se discute el modelo de la gota de líquido y la fórmula semiempírica de masas nucleares de Bethe-Weizsacker.

2.1) ANTECEDENTES.

Todavía hacia finales del siglo XIX se creía que el átomo era la última unidad de materia; más aun, ni siquiera se tenía idea de la existencia del núcleo. En 1896 se descubrió el fenómeno de la radiactividad. Los rayos alfa, beta y gamma emitidos por algunos átomos generaron la sospecha de que existía algo aún más elemental que el átomo. J.J. Thomson en 1898 ideó un modelo atómico en el que consideraba al átomo como un "pudín" de carga positiva con "pasas" de carga negativa, de tal modo que el átomo fuera eléctricamente neutro. Años después, en 1911, Rutherford realizó experimentos de dispersión de partículas alfa por una lámina delgada de oro. Los resultados que obtuvo lo llevaron a concluir que toda la carga positiva del átomo, así como casi toda su masa, están contenidas en un cuerpo central muy pequeño, 10 E 5 veces menor que el átomo*; a este cuerpo se le denominó núcleo atómico.

En los siguientes años se realizaron diversos avances de importancia. Entre ellos el descubrimiento, en 1932, del neutrón por Chadwick, el desarrollo del modelo de la gota de líquido en 1936 y el modelo de capas del núcleo, este último, basado ya en la mecánica cuántica.

2.2) ESTRUCTURA DEL NUCLEO.

El núcleo del átomo está constituido por protones y neutrones; colectivamente, a estas partículas se les denomina nucleones. Las características de los nucleones se listan en la tabla 2.1.

TABLA 2.1

	PROTON	NEUTRON
CARGA	$+e = 1.6022 \text{ E } -19 \text{ C}$	0
MASA**	$1.6725 \text{ E } -27 \text{ Kg}$ $= 938.256 \text{ MeV}$ $= 1.007276 \text{ uma}$	$1.6748 \text{ E } -27 \text{ Kg}$ $= 939.550 \text{ MeV}$ $= 1.008665 \text{ uma}$
SPIN***	$1/2 \hbar$ (Fermión)	$1/2 \hbar$ (Fermión)
MOMENTO MAGNETICO	$2.79 \mu_N$	$-1.91 \mu_N$

* La unidad de longitud que se emplea en física nuclear es el Fermi (F): $1 \text{ F} = 10 \text{ E } -15 \text{ m}$.

** La unidad de masa atómica (uma) se define como un doceavo de la masa del átomo de C-12:

$$1 \text{ uma} = 1.660420 * 10 \text{ E } -27 \text{ Kg}$$

$$= 931.478 \text{ Mev}$$

*** $\hbar = h/2\pi$, donde h es la constante de Planck ($h = 4.14 * 10 \text{ E } -21 \text{ MeV} \cdot \text{segundo}$).

*V μ_N es el magnetón nuclear y es $\mu_N = e\hbar/2mp$.

La notación usual para representar una especie nuclear es



donde

Xy es el símbolo de la especie química, p.ej., Ag, Ni, Pb, etc., y

- Z, el número atómico, indica el número de protones.
- N, el número neutrónico, indica el número de neutrones.
- A = N + Z, el número másico, es el número de nucleones.

Es claro que para emprender el estudio de la sistemática de las masas nucleares es necesario clasificar los diversos núcleos de acuerdo con algún criterio. El criterio usualmente empleado es el siguiente:

- Los isótopos son núcleos con igual Z pero diferente A.
- Los isótonos son núcleos con igual N pero diferente A.
- Los isóbaros son núcleos con igual A pero diferente Z y N.

2.3) FUERZAS NUCLEARES.

Como ya se mencionó, los núcleos atómicos están formados por protones y neutrones. Entre los protones existe una atracción gravitacional y una repulsión Coulombiana. Ahora bien, independientemente de la distancia entre los protones, la repulsión Coulombiana es aproximadamente 2.2×10^39 veces más intensa que la atracción gravitacional.

De lo anterior se infiere que, para compensar la repulsión Coulombiana, es necesaria una interacción con componente atractiva dominante más intensa que la repulsión Coulombiana. Esta interacción recibe el nombre de fuerza nuclear y sus principales características son:

a) En el dominio de aplicación de las fuerzas nucleares, estas son mucho más intensas que la interacción Coulombiana.

b) Ya que a nivel molecular parece no haber necesidad de introducir fuerzas diferentes de las electromagnéticas para explicar los fenómenos conocidos, se deduce que las fuerzas nucleares son de corto alcance.

c) Las fuerzas nucleares tienen una componente atractiva dominante; sin embargo, de experimentos de dispersión nucleón - nucleón a altas energías (200 MeV) se ha encontrado que para

separaciones muy pequeñas entre los nucleones (menores que $1/2 F$) la interacción es fuertemente repulsiva.

d) En el único sistema ligado n-p que existe en la naturaleza, el deuterón, el spin del neutrón es paralelo al del protón dando lugar a un momento angular total igual a uno. Para el sistema n-p con spines antiparalelos no se conocen estados ligados. De esto se infiere que las fuerzas nucleares dependen del spin.

e) Experimentalmente se ha encontrado que, independientemente de las interacciones electromagnéticas, las interacciones nucleares entre pares n-n, n-p o p-p son prácticamente iguales, i.e., las fuerzas nucleares no dependen de la carga.

2.4 RADIO NUCLEAR.

La determinación del radio nuclear es hasta cierto punto arbitraria ya que el resultado de una medida depende del fenómeno empleado para determinar experimentalmente su valor.

Para obtener el radio nuclear se ha empleado la dispersión, por el núcleo, de partículas alfa, de neutrones, de protones y de electrones de diversas energías. De estos experimentos se encuentra que el radio nuclear y el número de masa atómica están relacionados por:

$$R = r_0 A^{1/3}, \quad (2.2)$$

donde r_0 es una constante cuyo valor está entre 1.2 y 1.4 Fermis.

De la relación entre R y A se infiere que el volumen del núcleo es proporcional al número de nucleones. Lo anterior sugiere que, como de hecho ocurre, la densidad del núcleo (ρ) debe ser aproximadamente constante.

Supóngase que el núcleo tiene forma esférica*, entonces su volumen es

$$V = \frac{4}{3} \pi R^3 = \left(\frac{4}{3} \pi r_0^3 \right) A;$$

* Solamente algunos núcleos poseen forma esférica; lo más común, como lo indica la existencia de momentos cuadrupolares eléctricos del núcleo, es que los núcleos estén deformados, es decir, tanto la densidad de masa como la densidad de carga no son esféricamente simétricas.

aproximando la masa del núcleo por Am_p se concluye que la densidad es

$$\rho = \frac{m_p A}{\frac{4}{3} \pi r_0^3 A} = \frac{m_p}{\frac{4}{3} \pi r_0^3} \approx 10^{14} \text{ gr./cm}^3. \quad (2.3)$$

En la figura 2.1 se ilustra la constancia de la densidad de carga para algunos núcleos.

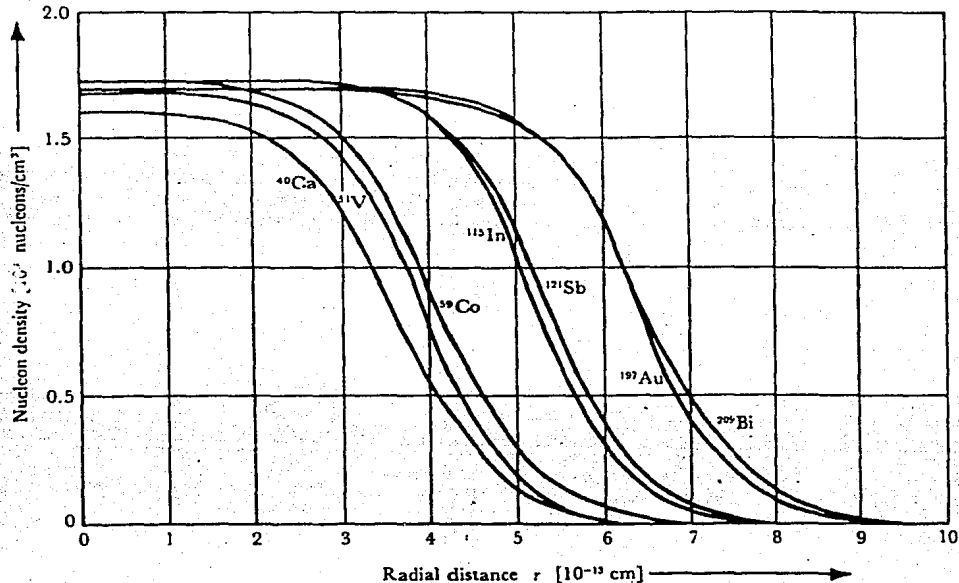


FIGURA 2.1. Distribución de la densidad de carga en núcleos pesados y semipesados como función de la distancia radial a partir del centro del núcleo, como indica la dispersión de electrones de 1 GeV. (De [Ma 69]).

2.5) ESTABILIDAD NUCLEAR.

No todas las combinaciones de protones y neutrones son estables; más aún, sólo existen 272 núcleos estables, cuya dependencia de N y Z se muestra en la figura (2.2).

En esta figura se observa que en los núcleos con número de masa mayor que aproximadamente 20, el número de neutrones es prácticamente igual al de protones y en los núcleos con número de masa mayor, el número de neutrones es en general mayor que el de protones. Lo anterior se debe a que la interacción Coulombiana, a

diferencia de la nuclear, se hace sentir en todo el núcleo y cuando Z es grande ($Z > 20$), la repulsión electrostática debe compensarse mediante un aumento de la atracción nuclear. Dicho aumento se consigue incrementando el número de neutrones relativo al de protones.

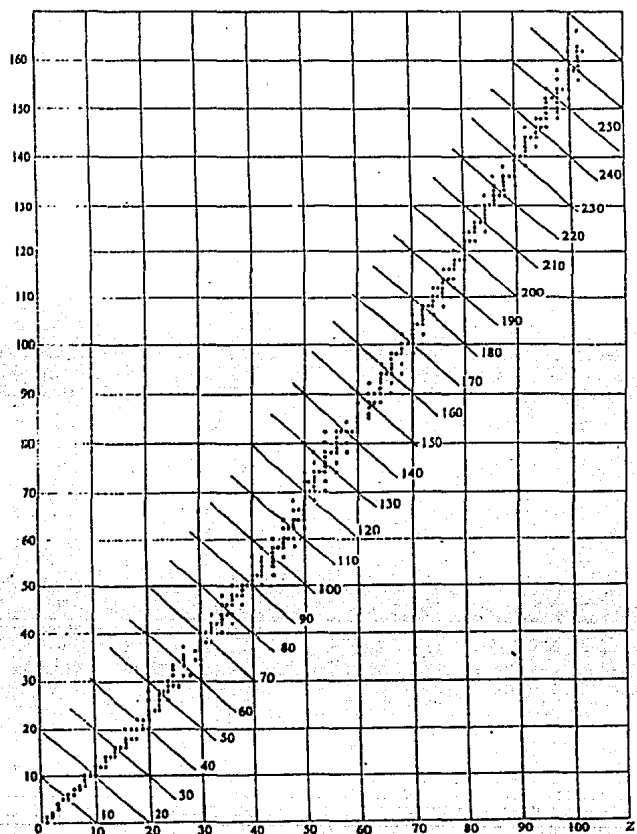


FIGURA 2.2. Representación de N vs Z para núcleos estables y radioactivos, donde se muestra el exceso de neutrones ($N > Z$) para los núcleos más pesados.

El número de neutrones no se puede incrementar tanto como se quiera. En efecto, los núcleos con un número de protones mayor que 83 y un número de masa mayor que 209 (${}_{83}^{209}\text{Bi}$) resultan ser inestables. En la tabla 2.2 se muestra la distribución de núcleos estables en función de Z y N . Obsérvese que predominan los núcleos en los que, al menos, un grupo de nucleones es un número par.

TABLA 1.1

Z	N	Número de núcleos
par	par	160
par	impar	56
impar	par	52
impar	impar	4

2.6) MASAS NUCLEARES Y ENERGIA DE AMARRE.

La masa de los diversos núcleos no coincide nunca con la suma $Nm_n + Zm_p$ a la diferencia

$$\Delta M = (m_n N + m_p Z) - M_N(A, Z) \quad (2.2)$$

se le denomina déficit de masa.

El déficit de masa se entiende pensando en términos de la equivalencia entre la masa y la energía. La energía faltante es la que se desprendió al formarse el núcleo y que debe proporcionársele si se desea "romperlo" en sus componentes básicos. A esta energía se le denomina energía de amarre (BE):

$$BE \equiv \Delta M c^2 = [m_n N + m_p Z - M_N(A, Z)] c^2. \quad (2.3)$$

El valor de la energía de amarre aumenta conforme se incrementa la masa atómica A. Experimentalmente se encuentra que la energía de amarre por nucleón, BE / A , es prácticamente constante, figura (2.3).

La energía de separación, $S(A, Z)$, se define como la energía necesaria para remover la partícula menos ligada del núcleo. La expresión de dicha energía para el caso de protones es

$$S_p = BE(Z, A) - BE(Z-1, A-1). \quad (2.4)$$

La energía de separación para neutrones, se obtiene de manera análoga y es

$$S_p = BE(Z, A) - BE(Z, A-1). \quad (2.7)$$

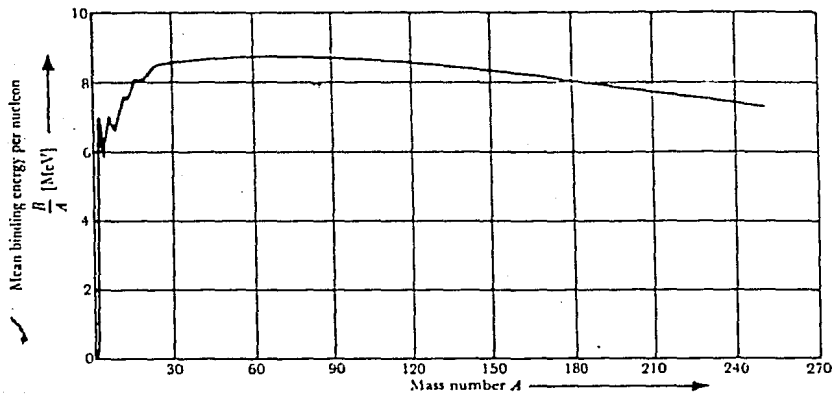


FIGURA 2.6. Energía de amarre promedio por nucleón, BE / A vs A . Para A mayor que aproximadamente 30, el valor de BE / A permanece esencialmente constante, lo que indica que las fuerzas nucleares son saturables.

2.7) EL MODELO DE LA GOTA DE LIQUIDO Y LA FORMULA SEMIEMPIRICA DE MASAS.

Hasta el momento no existe una teoría nuclear completa, es decir, una teoría que unifique las diferentes características del núcleo. Debido a lo anterior se han desarrollado diferentes modelos del núcleo que resaltan, cada uno, diversos aspectos del mismo.

La masa nuclear, ecuación (2.5), se obtiene por

$$M_N(Z, A) = m_p Z + m_n N - BE,$$

donde BE es la energía de amarre expresada en unidades de masa. De esta expresión se ve que si se pudiera calcular BE a partir de una fórmula general, entonces todas las masas podrían evaluarse teóricamente.

La densidad y la energía de amarre por nucleón tienen valores esencialmente constantes; esto establece una analogía entre el núcleo y una gota de líquido en la cual la densidad y el calor de vaporización son independientes del tamaño de la gota. Explotando la analogía núcleo - gota, complementada con algunas otras características; Weizsacker, Bethe y Bacher obtuvieron una expresión para la energía de amarre. Esta expresión es

$$BE = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_{sym} \frac{(N-Z)^2}{A} + \delta, \quad (2.6)$$

y se le conoce como fórmula semiempírica de masas o fórmula de Bethe - Weizsacker.

En lo que resta de esta sección se discutirá la estructura y el significado asociado con los distintos términos de la fórmula de masas.

-Término de volumen. En un líquido, la energía calorífica necesaria para evaporar una gota es proporcional al tamaño de la gota. En el núcleo se propone, en primera aproximación, que la energía de amarre es proporcional al volumen, pero el volumen es proporcional a A ; así, se tiene un primer término de la energía de amarre de la forma $a_v A$.

-Término de superficie. Si sólo se considera el término de volumen, se está sobreestimando la energía de amarre, BE , ya que algunos de los nucleones están en la "superficie" del núcleo y, por lo tanto, no interactúan con el mismo número de nucleones con el que interactúan los nucleones "interiores"; en consecuencia, al término de volumen se le debe sustraer un término que sea proporcional a la superficie del núcleo; el nuevo término es $-a_s A^{2/3}$.

-Término de Coulomb. La repulsión Coulombiana entre los protones es proporcional al número de pares $Z(Z - 1)/2$ e inversamente proporcional a su distancia promedio. Si se toma el radio nuclear como distancia promedio y se aproxima $Z(Z - 1)/2$ por Z^2 se obtiene el término de Coulomb $a_c Z^2/A^{1/3}$.

-Término de asimetría (Exceso de neutrones). En la figura 2.2 se observa que alrededor de $Z = 20$, los núcleos estables se concentran en la vecindad de la línea $N = Z$. Esto es razonable ya que los protones y los neutrones obedecen el principio de exclusión de Pauli y en cualquier distribución de nucleones diferente de $N = Z$, la energía total del sistema aumenta con respecto a la energía del sistema cuando $N = Z$. Sin embargo, conforme se incrementa el número de protones la fuerza de Coulomb se incrementa, de modo que los núcleos pesados con un número igual de protones y neutrones no pueden permanecer ligados establemente. Un exceso de neutrones ($N - Z$) debe estar presente para proporcionar una fuerza nuclear atractiva lo suficientemente poderosa como para contrarrestar la interacción de Coulomb; en todo caso, causa una pérdida mayor de energía la repulsión Coulombiana que la desviación de la línea $N = Z$.

La fracción del volumen nuclear afectada por el exceso de neutrones es $(N - Z) / A$ y en esta fracción del volumen hay $N - Z$ nucleones, entonces el déficit de energía se encuentra por el producto de estas dos cantidades. Se propone el término de asimetría $-a_{sym} (N - Z)^2 / A$.

-Término de apareamiento. De la tabla 2.2 se ve que los núcleos con un número par de neutrones y protones tienden a ser muy estables, los núcleos con un número par de protones e impar de neutrones o un número impar de protones y par de neutrones son un poco menos estables y los núcleos con Z y N impares son

básicamente inestables.

Para tomar en cuenta este efecto de apareamiento, se le agrega a la fórmula de masas un nuevo término, donde:

$$\delta = \begin{cases} -\delta & \text{para núcleos par-par} \\ 0 & \text{para núcleos par-impar} \\ 0 & \text{para núcleos impar-par} \\ +\delta & \text{para núcleos impar-impar} \end{cases}$$

Un ejemplo de expresión para δ es

$$\delta = a_p A^{-3/4}$$

Un conjunto representativo de valores para los coeficientes es ([Ev 55]):

$$a_v = 14.1 \text{ MeV,}$$

$$a_s = 13.0 \text{ MeV,}$$

$$a_c = 0.6 \text{ MeV,}$$

$$a_{\text{sym}} = 19.0 \text{ MeV,}$$

$$a_p = 33.5 \text{ MeV.}$$

La fórmula de masas de Bethe - Weizsacker constituyó un gran éxito ya que sus resultados se ajustan muy bien a los resultados experimentales (la desviación es del orden del 1 %).

CAPITULO 3

ESTRUCTURA NUCLEAR DE CAPAS

En este capítulo se presenta el "marco de referencia" en el que se basa el presente trabajo. Los temas que aquí se tratan esquemáticamente son:

a) MODELO DE CAPAS. Cierta evidencia experimental acerca del núcleo, se explica si se supone que éste presenta una estructura de capas de nucleones similar a la de las capas electrónicas en el átomo.

b) METODO DE HARTREE-FOCK (H-F). El método variacional de Hartree-Fock proporciona la fundamentación teórica del modelo de capas y la posibilidad de obtener expresiones algebraicas para la energía de amarre (masa nuclear).

c) MASA EFECTIVA. Del método de H-F surge, de manera natural, un potencial no local en la ecuación de Schrodinger de los orbitales independientes. Mediante el empleo de la aproximación de masa efectiva la ecuación de Schrodinger con términos no locales se transforma en una ecuación de Schrodinger de la que se han eliminado dichos términos; esto simplifica los desarrollos posteriores.

3.1) MODELO DE CAPAS

En la figura 3.1 se observa que los núcleos con número neutrónico o protónico igual a 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126, presentan una diferencia mayor entre la energía de amarre experimental y la energía de amarre promedio que la diferencia existente para los núcleos aledaños, es decir, estos núcleos, llamados mágicos, son relativamente más estables que sus vecinos.

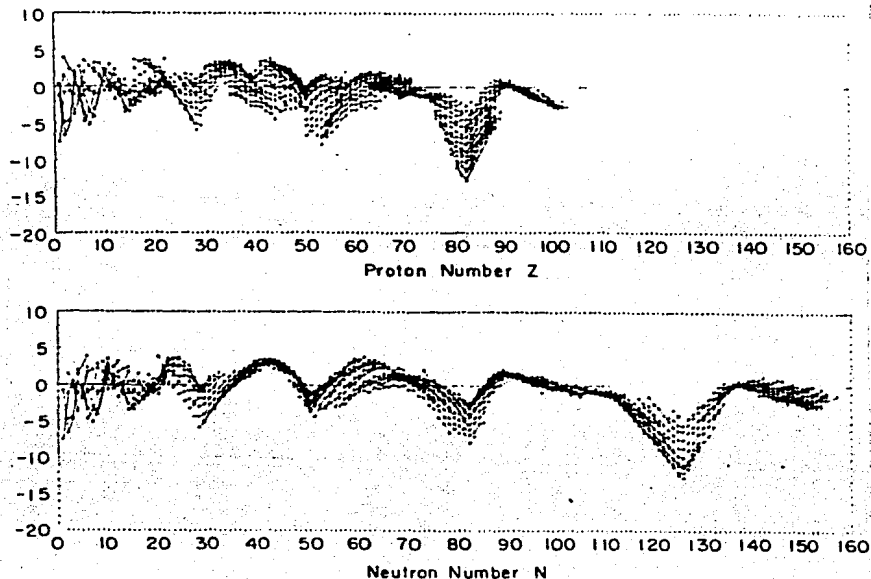


FIGURA 3.1. Desviaciones de las masas nucleares de sus valores medios. (Tomada de W. D. Myers and W. J. Swiatecki. Nucl. Phys. 81 (1956). Referida en [RS 80]).

Considérese la figura (3.2), en esta figura se observa que los núcleos que están en la vecindad de los núcleos mágicos, tienen energías de separación menores, por 1 ó 2 MeV, que las energías de separación correspondientes a los núcleos mágicos.

Lo anterior sugiere una estructura de capas nuclear análoga a la del modelo de capas de electrones en el átomo.

La estructura de capas de electrones en el átomo, se debe a que los electrones son partículas sujetas a la acción de un potencial electrostático que es generado por la carga positiva del núcleo. Por lo tanto, en primera instancia, es dable considerar a los electrones moviéndose independientemente en el campo central común y sujetos además al Principio de Exclusión de Pauli.

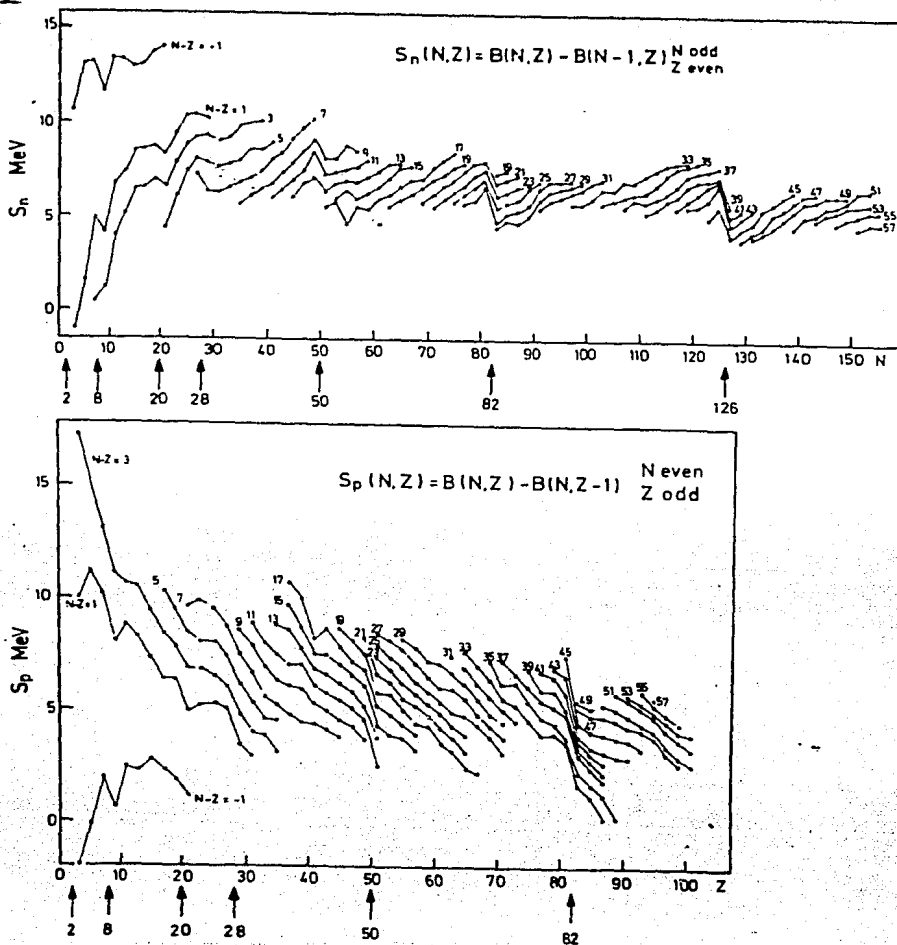


FIGURA 3.2. Energías de separación para neutrones y protones. (Tomada de J. M. Irvine. Nuclear Structure Theory. Pergamon, Oxford, 1972. Referida en [RS 80]).

Los nucleones no están sujetos a la acción de un potencial común; sin embargo, los resultados mencionados al principio de esta sección se pueden obtener considerando a los nucleones, en primera aproximación, como partículas independientes sujetas a la acción de un potencial promedio, producido por el efecto conjunto de las interacciones entre los nucleones. Además, no debe olvidarse que los protones y los neutrones son partículas de Fermi y que, por lo tanto, obedecen a el principio de Exclusión de Pauli.

Para obtener una idea cualitativa de la forma de dicho potencial, recuérdese que la densidad del núcleo es constante y que las fuerzas nucleares son de corto alcance; así, es de esperarse que la forma del potencial promedio siga la de la densidad.

Un tipo de potencial que se emplea a menudo como potencial común es, en el caso de núcleos esféricos, el potencial de Woods-Saxon (W-S). La expresión analítica de este potencial es

$$V^{WS}(r) = -V_0 \left[1 + \exp\left(\frac{r-R_0}{a}\right) \right], \quad (3.1)$$

donde $R_0 = r_0 A^{1/3}$, $V_0 \approx 50 \text{ MeV}$, $a \approx 0.5 \text{ F}$, $r_0 \approx 1.2 \text{ F}$.

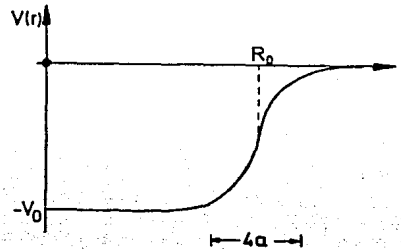


Figure 2.3. Shape of the Woods-Saxon potential.

FIGURA 3.3. Forma del potencial W-S

Al sustituir este potencial en la ecuación de Schrödinger no se obtiene una fórmula analítica para los niveles de energía; debido a esto, generalmente se usan los potenciales de oscilador armónico y de pozo cuadrado.

Los niveles de energía en el potencial de W-S están situados, figura(3.4), entre los generados por los potenciales de oscilador armónico y de pozo cuadrado, con parámetros adecuados.

Los diversos potenciales locales que se usaron para describir la estructura de capas del núcleo no generaron, al resolver la ecuación de Schrodinger con los mismos, los números mágicos que se esperaban de las observaciones. En 1949 Mayer y Jensen encontraron la solución a este problema proponiendo que al potencial se le debe adicionar un término que muestre una fuerte interacción spin-órbita invertida, es decir, si $\vec{S} \cdot \vec{L} > 0$, entonces la energía del nucleón disminuye y si $\vec{S} \cdot \vec{L} < 0$, la energía del nucleón aumenta. En la figura (3.5) se ilustra cómo, al incluir el término de spin-órbita, se obtienen los números mágicos que se esperaban.

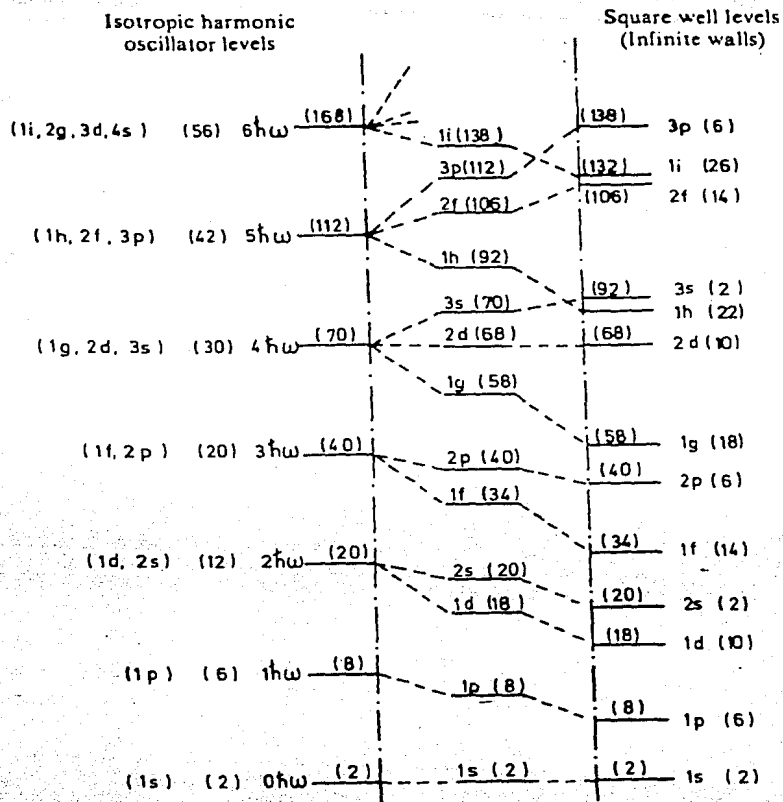


FIGURA 3.4. Esquema de niveles para el oscilador armónico isotrópico y para el pozo cuadrado infinito. (De [RS 80]).

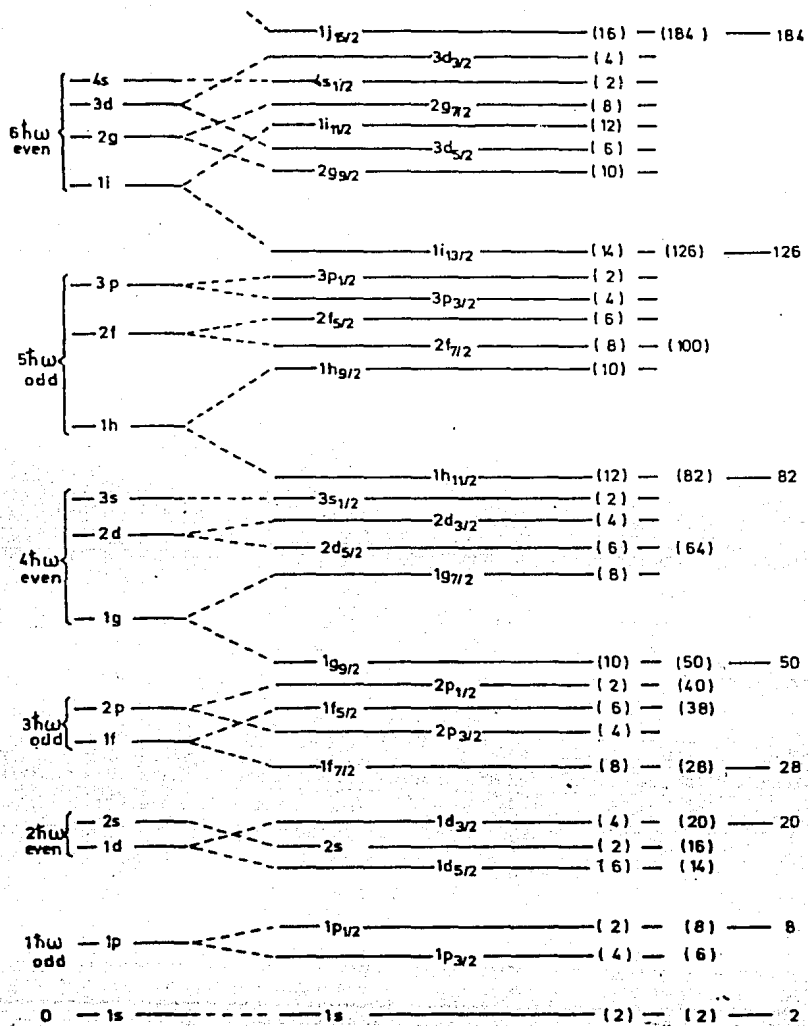


FIGURA 3.5. Representación esquemática de los niveles nucleares del modelo de capas incluyendo un término de spin-órbita. (Misma referencia que la de la figura 3.4)

3.2) METODO DE HARTREE-FOCK.

Esta sección se divide en dos partes. En la primera parte se presenta el método variacional y en la segunda parte se describe una importante aplicación de éste: el método de H-F.

a) METODO VARIACIONAL

La ecuación de Schrodinger independiente del tiempo es

$$\hat{H}|\Psi_{E_i}\rangle = E_i |\Psi_{E_i}\rangle, \quad (3.2)$$

donde los $|\Psi_{E_i}\rangle$ representan los vectores de estado y los E_i son los valores propios del operador \hat{H} . Si los vectores de estado no están normalizados, la energía del i -ésimo estado es

$$E_i = \frac{\langle \Psi_{E_i} | \hat{H} | \Psi_{E_i} \rangle}{\langle \Psi_{E_i} | \Psi_{E_i} \rangle}. \quad (3.3)$$

En una gran variedad de problemas la ecuación de Schrodinger no se puede resolver exactamente; sin embargo, se desea encontrar la energía del estado base, o de estados excitados, aunque sea aproximadamente. El método variacional es una guía en este sentido.

Considérese, por ejemplo, el caso de la energía del estado base, E_0 . Sea $|\Psi\rangle$ un vector de estado arbitrario. El vector de estado se puede expresar como combinación lineal de los estados exactos,

$$|\Psi\rangle = \sum_i c_i |\Psi_{E_i}\rangle, \quad (3.4)$$

ya que siendo eigenvectores de un operador hermiteano, forman base. Sustituyendo esta expresión en la ecuación (3.3) y suponiendo normalizadas las funciones de onda, se obtiene que

$$E = \frac{\sum_i E_i |c_i|^2}{\sum_i |c_i|^2} \geq \frac{\sum_i E_0 |c_i|^2}{\sum_i |c_i|^2} = E_0 \quad (3.5)$$

ya que $E_i > E_0$ para toda $i \neq 0$. El valor obtenido en (3.5) es una cota superior de la energía del estado base.

La importancia de este resultado reside en que gracias a él, se tiene la seguridad de que si se varía el vector de estado arbitrario de tal forma que se minimice la energía, ésta será al menos igual que la energía del estado base.

b) METODO DE HARTREE-FOCK

El método de Hartree-Fock consiste en proponer un vector de prueba que satisfaga:

- a) la hipótesis de independencia de las partículas
 y
 b) el principio de exclusión de Pauli.

Un vector de estado adecuado, i.e., uno que cumple los requisitos anteriores, es uno con la forma de un determinante de Slater, cuya representación en el espacio de configuración es

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_1(\vec{r}_1) & \dots & \psi_1(\vec{r}_N) \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_N(\vec{r}_1) & \dots & \psi_N(\vec{r}_N) \end{vmatrix}, \quad (3.6)$$

donde las $\{\psi_i\}$ forman un conjunto de funciones ortogonales. Sustituyendo el determinante en la ecuación (3.3),

$$E = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle},$$

en la que el Hamiltoniano es de la forma:

$$\hat{H} = \sum_i \hat{T}_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \hat{V}_{ij}, \quad (3.7)$$

y variando la función de prueba por medio de variaciones independientes en el conjunto $\{\psi_i\}$, de tal forma que sea un extremo y con la condición de normalización $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$, se concluye:

$$\delta E = \langle \delta \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - e \langle \delta \Psi | \Psi \rangle = 0, \quad (3.8)$$

donde e es un multiplicador de Lagrange.

Al realizar la variación anterior se obtiene, para cada uno de los orbitales, la ecuación integrodiferencial:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi_k(\vec{r}_k) + V^L(\vec{r}) \varphi_k(\vec{r}) + \int d\vec{r}' V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_k(\vec{r}') = e_k \varphi_k(\vec{r}),$$

(3.9)

donde:

- el término local, $V^L(\vec{r})$, se denomina término directo y es

$$\begin{aligned} V^L(\vec{r}) &= \int d\vec{r}' v(\vec{r}, \vec{r}') \sum_{j=1}^A |\varphi_j(\vec{r}')|^2 \\ &= \int d\vec{r}' v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}'), \end{aligned}$$

(3.10)

- el término no local, $V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}')$, se denomina término de intercambio y es

$$\begin{aligned} V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}') &= -v(\vec{r}, \vec{r}') \sum_{j=1}^A \varphi_j^*(\vec{r}') \varphi_j(\vec{r}) \\ &= -v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}, \vec{r}'); \end{aligned}$$

(3.11)

nótese que el multiplicador de Lagrange es precisamente la energía de partículas individuales.

En la práctica, la ecuación de Schrodinger no local puede resolverse por iteración. Comenzando con un conjunto completo de funciones de onda se calculan V^L y V^{NL} , sustituyendo estos potenciales en la ecuación (3.9) se obtiene entonces un nuevo conjunto de funciones de onda de partícula independiente, y así sucesivamente. Este procedimiento se sigue hasta que se obtiene la condición de convergencia, es decir, hasta que los potenciales permanecen prácticamente constantes en dos pasos consecutivos.

Es importante notar que la no localidad del potencial se debe a la antisimetrización de la función de onda. La variación de un producto simple de funciones de onda sin antisimetrizar genera solamente el potencial local.

La energía del estado no se obtiene sumando simplemente los niveles, i.e., $E_0 \neq \sum e_i$, como ocurre con partículas independientes bajo la acción de un campo externo y donde las partículas llenan los niveles más bajos de energía, de acuerdo con el principio de exclusión de Pauli. Lo anterior se debe a que al calcular el potencial promedio, a partir del desarrollo de la variación que se tiene en la ecuación (3.8), se considera dos veces la interacción de los nucleones; por lo tanto, la energía del estado base es

$$E_0 = \sum_i (t_i + \frac{1}{2} v_i) = \sum_i (t_i + e_i)/2, \quad (3.12)$$

donde

$$t_i = \int d\vec{r} \cdot \varphi_i^*(\vec{r}) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right) \varphi_i(\vec{r}) \quad (3.13a)$$

y

$$v_i = \int d\vec{r} \varphi_i^*(\vec{r}) V(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) + \int d\vec{r} d\vec{r}' \varphi_i^*(\vec{r}) V_{NL}(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_i(\vec{r}') \quad (3.13b)$$

3.3) NO LOCALIDAD Y APROXIMACION DE MASA EFECTIVA ([He 79], p.p. 3.1-3.13 y apéndice I).

El modelo de capas asume que los nucleones se mueven independientemente en un pozo de potencial, cuya forma es análoga a la de la distribución de la densidad. En un principio, el potencial se escogía a partir de una base puramente fenomenológica; sin embargo, es más adecuado partir de un potencial para el modelo de capas cuyo fundamento sea microscópico. En este sentido, el esquema teórico lo constituye el método de H-F, del cual surge de manera natural un potencial no local de partícula independiente.

En base al potencial no local se pueden encontrar los niveles de energía, ecuación (3.9), para después obtener la energía total del núcleo, ecuación (3.12).

Bauer y Herrera ([BH 80]), empleando la aproximación de masa efectiva a la ecuación de Schrodinger con una componente no local del potencial, mostraron una conexión entre el modelo óptico fenomenológico de las reacciones nucleares y el modelo de capas.

Estos autores simularon el potencial de H-F (potencial

autoconsistente) mediante un potencial fenomenológico cuyas características se determinan a partir de los parámetros del potencial óptico. Esto es conveniente ya que al sustituir el potencial autoconsistente por uno fenomenológico se obtienen con mayor facilidad expresiones para los niveles de energía, lo cual permite encontrar una fórmula del tipo Bethe-Weizsacker para la energía de amarre. Además, el uso de los parámetros del potencial óptico fenomenológico es adecuado ya que este es un potencial bastante general, es decir, se aplica sobre una gran extensión de la tabla nuclear.

A continuación se mostrará la conexión existente entre el modelo de partícula independiente y el modelo óptico fenomenológico ([BH 80]). Para esto, se sigue el planteamiento de Frahn y Lemmer (ver Frahn - Lemmer 1957a, Nuovo Cim. 5, 1564 y Frahn - Lemmer 1957b, Nuovo Cim. 6, 664, Referidos en [He 79]) que explora las características de la ecuación de Schrodinger con un potencial no local, que, en el espacio de configuración, es:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) + V_c(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) + \int V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}') \Psi(\vec{r}') d\vec{r}' = E \Psi(\vec{r}) \quad (3.14)$$

donde se ha incluido el potencial de Coulomb, $V_c(\vec{r})$.

Se supone que el potencial, $V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}')$, satisface las siguientes condiciones:

- Es Hermiteano, o equivalentemente, si es real, simétrico en \vec{r} y \vec{r}' .
- En materia nuclear infinita*, el potencial debe ser invariante bajo translaciones.
- La no localidad no es muy grande, ya que los potenciales locales han generado resultados que se aproximan a los experimentales.

La estructura de $V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}')$ propuesta por Frahn y Lemmer es:

$$V^{NL}(\vec{r}, \vec{r}') = W \left(\frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2} \right) \delta_a(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (3.15)$$

donde $\delta_a(\vec{r}, \vec{r}')$ es una función que tiende a la delta de Dirac cuando el alcance a tiende a cero. La expresión que ellos usaron para

* Se denomina materia nuclear infinita a un medio uniforme hipotético, formado por un número igual, que tiende a infinito, de protones y de neutrones, cuyo volumen tiende a infinito, con densidad constante y en el que no hay interacción Coulombiana.

la delta de Dirac es

$$\delta_a(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{1}{\sqrt{(\pi a^2)^3}} e^{-\left(\frac{\vec{r}-\vec{r}'}{a}\right)^2} \quad (3.16)$$

Sea $g_a(k^2)$ la transformada de Fourier de $\delta_a(\vec{s})$,

$$g_a(k^2) = \int \delta_a(|\vec{s}|) e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} d\vec{s}, \quad (3.17)$$

donde $\vec{s} = \vec{r} - \vec{r}'$. Desarrollando $g_a(k^2)$ en serie de Taylor alrededor de un cierto valor k^2 ,

$$g_a(k^2) = g_a(k^2) + (k^2 - k^2) g_a'(k^2) + \dots$$

y tomando sólo hasta el primer orden del desarrollo para eliminar la integral en la ecuación (3.14), se obtiene la aproximación

$$-\frac{\hbar^2}{8m_0} \left[\nabla^2 \frac{1}{M(\vec{r}, k^2)} + \nabla \cdot \frac{1}{M(\vec{r}, k^2)} \nabla + \frac{1}{M(\vec{r}, k^2)} \nabla^2 \right] \Psi(\vec{r}) + \left[\left\{ g_a(k^2) - k^2 g_a'(k^2) \right\} W_N(\vec{r}) + W_C(\vec{r}) - E \right] \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (3.18)$$

donde

$$M(\vec{r}, k^2) = \frac{m_0}{1 + \frac{2m_0}{\hbar^2} g_a'(k^2) W_N(\vec{r})} \quad (3.19)$$

Tomando $k^2 \equiv 0$, la ecuación (3.17) se reduce a

$$\frac{1}{8} \left[\vec{P}^2 \frac{1}{M(\vec{r})} + 2\vec{P} \cdot \frac{1}{M(\vec{r})} \vec{P} + \frac{1}{M(\vec{r})} \vec{P}^2 \right] \Psi(\vec{r}) + \left[W_C(\vec{r}) + W_N(\vec{r}) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (3.20)$$

denominada aproximación de masa efectiva; en este caso, la masa efectiva depende de \vec{r} :

$$M(\vec{r}) = \frac{m_0}{1 - \frac{a^2 m_0}{2\hbar^2} W_N(\vec{r})} \quad (3.21)$$

En lo que sigue sólo se considerarán potenciales esféricos, y se tomará

$$W_N(\vec{r}) = -W_0^N f_N(\vec{r}) \quad (3.22a)$$

y

$$W_C(\vec{r}) = W_0^C f_C(\vec{r}), \quad (3.22b)$$

donde $f_N(0) = 1 = f_C(0)$ y $W_0^N, W_0^C > 0$. El factor de forma nuclear, $f_N(r)$ es prácticamente constante en el interior del núcleo y cuando r se aproxima al valor del radio nuclear, su valor tiende rápidamente a cero. El factor $f_C(r)$ corresponde al de una distribución uniforme de carga, de tal forma que permanece aproximadamente constante en el interior del núcleo y a partir de su superficie decrece como $1/r$.

La expresión (3.22a) se puede escribir

$$W_N(\vec{r}) = -W_0^N + W_0^N [1 - f_N(r)], \quad (3.23)$$

entonces la masa efectiva se desdobra como

$$M(\vec{r}) = m_0 \left\{ 1 + \beta - \beta [1 - f_N(r)] \right\}^{-1}, \quad (3.24)$$

donde

$$\beta \equiv \frac{a^2 m_0}{2\hbar^2} W_0^N > 0 \quad (3.25)$$

Al sustituir (3.24) en (3.20), se obtiene

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} (1+\beta) \nabla^2 + W_N(r) + W_C(r) + W'(r, \nabla) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (3.26)$$

donde

$$W'(r, \nabla) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \beta \left[(1 - f_N(r)) \nabla^2 + 2\nabla \cdot (1 - f_N(r)) \nabla + \nabla^2 (1 - f_N(r)) \right], \quad (3.27)$$

es decir, el potencial no local de partícula independiente es equivalente a un potencial que depende de la posición, de la velocidad y de la presencia de una masa efectiva constante.

La relación entre los parámetros de la ecuación de Schrodinger y los del potencial óptico fenomenológico, que se obtienen experimentalmente, se encuentra del análisis de los estados de dispersión de la ecuación (3.26).

Despejando la energía cinética de la ecuación (3.26),

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}) = \frac{E - W_N(r) - W_C(r) - W'(r, \nabla)}{1 + \beta} \Psi(\vec{r}), \quad (3.28)$$

y sustituyendo el término $-\beta \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi$ en la misma ecuación, esta se reduce a

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + W(r, E, \nabla) + W_C(r) \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (3.29)$$

donde

$$W(r, E, \nabla) = \frac{W_N(r) + W'(r, \nabla) + \beta(E - W_C(r))}{1 + \beta} \quad (3.30)$$

En materia nuclear infinita, $f_N(r) \equiv 1 \equiv f_C(r)$, el potencial W' se anula y, por lo tanto,

$$W = \frac{1}{1 + \beta} [W_0^N - \beta E + \beta W_0^C]. \quad (3.31)$$

En base a esto, el potencial para núcleos finitos se aproxima como

$$Y(r, E) = W(E) f_N(r) = -\frac{1}{1 + \beta} [W_0^N - \beta E + \beta W_0^C] f_N(r) \quad (3.32)$$

y, comparando con la parte real del potencial óptico,

$$Y_{op}(r, E) = -\left[V_{op} - \alpha E + \alpha_c \frac{Z}{A^{1/3}} \right] f_N(r) \quad (3.33)$$

se obtienen las siguientes relaciones:

$$W_0^N = (1 + \beta) V_{op}, \quad (3.34a)$$

$$\frac{\beta}{1 + \beta} = \alpha, \quad \beta = \frac{\alpha}{1 - \alpha} \quad (3.34b)$$

$$\alpha W_0^C = \alpha_c Z / A^{1/3} \quad (3.34c)$$

Ahora bien, β se definió como

$$\beta \equiv \frac{\alpha^2 m_0 W_0^N}{2 \hbar^2} > 0,$$

entonces, sustituyendo (3.22) en (3.34b) y (3.34a) se obtiene el rango de no localidad en función de V_{op} y de α :

$$\alpha = \sqrt{\frac{2 \hbar^2}{m_0 V_{op}}} \quad (3.34d)$$

Una vez obtenidos W_0^N , β , W_0^C y α ya se pueden estudiar los estados ligados del núcleo.

En el interior del núcleo el factor de forma nuclear es prácticamente constante, $f_N(r) \approx 1$, entonces, el potencial $W^l(r, \rho)$ es pequeño comparado con $W_N(r)$ y $W_C(r)$. Esto permite considerar W^l como una perturbación a la ecuación

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + W_N(r) + W_C(r) \right] \psi_{\nu}^{(0)} = E_{\nu} \psi_{\nu}^{(0)}, \quad (3.35)$$

donde la masa efectiva es

$$m^* = M(r=0) \equiv \frac{m_0}{1 + \beta} \quad (3.36)$$

Ahora, la ecuación de Schrodinger en el caso local es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 + V^l(r) + W_C^l(r) \right] \psi_{\nu}^{(0)} = E_{\nu} \psi_{\nu}^{(0)}. \quad (3.37)$$

Esta ecuación se obtiene dividiendo la ecuación de Schrodinger no local por $(1 + \beta)$. Entonces, la relación entre los niveles de energía en el caso local con los del no local está dada por:

$$E_{\nu} = \frac{E_{\nu}^{(0)}}{1 + \beta}$$

es decir,

$$E_{\nu}^{(0)} = \frac{m_0}{m^*} E_{\nu}, \quad (3.38)$$

relación que será de gran utilidad más adelante.

La profundidad del potencial óptico depende del tipo de nucleón (protones o neutrones). Dicho potencial se acostumbra escribir en la forma

$$V_{op} = V_0 + \zeta I V_1, \quad (3.39)$$

donde $\zeta = -1$ para neutrones, $\zeta = 1$ para protones e $I = (N-Z)/A$.

Ahora bien, la masa efectiva depende de la profundidad del pozo, i.e., depende del tipo de nucleón. Según la ecuación (3.24), se tiene

$$m^* \equiv M(0) = \frac{m_0}{1 - \frac{\alpha^2 m_0}{2\hbar^2} W_N(0)}$$

donde $W_N(0) = -W_0^N$ de acuerdo con la ecuación (3.22a). Así, de la expresión (3.34a) se obtiene

$$W_0^N = \frac{m_0}{m^*} (V_0 + \zeta I V_1) \quad (3.40)$$

Si la forma de W_0^N es

$$W_0^N = W_0 + \zeta I W_1, \quad (3.41)$$

entonces

$$\frac{m_0}{m^*} = 1 + \mu (W_0 + \zeta I W_1), \quad (3.42)$$

donde $\mu \equiv \frac{\alpha^2 m_0}{2\hbar^2}$; por lo tanto, la masa efectiva promedio,

$$\left(\frac{m}{m^*}\right)_0 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{m_0}{m^*}\right)_P + \left(\frac{m_0}{m^*}\right)_N \right] \quad (3.43)$$

(donde los subíndices P y N se refieren a protones y neutrones respectivamente), puede escribirse como

$$\left(\frac{m}{m^*}\right) = 1 + \mu W_0. \quad (3.43')$$

Adicionalmente se tiene

$$W_1 = \frac{1}{2I} \left[\left(\frac{m_0}{m^*}\right)_P - \left(\frac{m_0}{m^*}\right)_N \right]. \quad (3.44)$$

Sumando las expresiones (3.41) y (3.42), para protones y neutrones, y dividiendo entre 2, se obtiene que

$$W_0 = \frac{m}{m^*} V_0 + \mu (IW_1)(IV_1). \quad (3.45)$$

Dejando μ de (3.43') y sustituyendo el resultado en (3.45), tenemos que

$$W = \frac{m}{m^*} V_0 + \left(\frac{m}{m^*} - 1\right) \frac{IW_1}{W_0} (IV_1), \quad (3.46)$$

que se puede reescribir como

$$W_0^2 - \frac{m}{m^*} V_0 W_0 - \left(\frac{m}{m^*} - 1\right) (IW_1)(IV_1) = 0. \quad (3.47)$$

Al resolver esta ecuación y desarrollar en series de potencias hasta primer orden, se encuentra

$$W_0 = \frac{m}{m^*} V_0 \left[1 + \frac{\left(\frac{m}{m^*} - 1\right) (IW_1)(IV_1)}{\left(\frac{m}{m^*} V_0\right)^2} \right] \quad (3.48)$$

Ahora de (3.42), restando el caso de protones al de neutrones, se obtiene

$$IW_1 = \mu IW_1 V_0 + \frac{m}{m^*} IV_1, \quad (3.49)$$

de donde

$$I W_1 = \frac{\frac{m_0}{m^*} I V_1}{1 - \mu V_0} \quad (3.50)$$

Despejando μ de (3.43') y aproximando W_0 por el primer término de (3.48), se obtiene que

$$I W_1 = \left(\frac{m}{m^*}\right)^2 I V_1 \quad (3.51)$$

De (3.43') y (3.51) se pueden calcular $(m_0/m^*)_P$ y $(m_0/m^*)_N$ en términos de la masa efectiva promedio, de donde se

$$\left(\frac{m_0}{m^*}\right)_{P,N} = \left(\frac{m_0}{m^*}\right)_0 \left\{ 1 + \mathcal{G} \left[\left(\frac{m}{m^*}\right) - 1 \right] I \frac{V_1}{V_0} \right\} \quad (3.52)$$

CAPITULO 4

NIVELES DE ENERGIA Y FORMULA DE MASAS NUCLEARES

A pesar de que mediante cálculos autoconsistentes es posible calcular las energías de amarre para los diversos núcleos, éstos, además de su complejidad, no proporcionan una expresión algebraica para la misma.

Con el propósito de obtener una expresión algebraica para la energía de amarre, congruente con el modelo de capas, Bauer y Herrera sustituyeron el potencial autoconsistente de la ecuación de Schrodinger por uno fenomenológico con parámetros adecuados y, a partir de este, obtuvieron expresiones para los niveles de energía. Sumando adecuadamente dichas expresiones, se obtiene una fórmula para la energía total del tipo de la fórmula semiempírica de Bethe-Weizsacker.

En este capítulo, se describe brevemente el planteamiento fenomenológico para el cálculo de la energía de amarre de los núcleos, del cual, el presente trabajo es un complemento.

El trabajo de J. Herrera ([He 79]), que se describe a continuación, consideró exclusivamente un potencial común esférico y determinó la relación algebraica entre la energía y el número de nucleones para el caso de capa llena. La expresión que se obtuvo se aplicó a toda la tabla periódica, dando como resultado un ajuste global compatible con el de la fórmula de Bethe-Weizsacker, esto es, muestra la desviación sistemática asociada con los números mágicos. Este trabajo omite, por lo tanto, la existencia de deformación y las modificaciones a la relación algebraica generadas por el llenamiento parcial de la última capa en el caso de núcleos diferentes a los mágicos. La consideración de estos dos aspectos lleva a la definición de una corrección por deformación, misma que fue tratada por A. Rosales en su tesis de licenciatura ([Ro 84]), y una corrección por llenamiento de capas.

Considerando a los protones y a los neutrones como gases de Fermi independientes, la energía del núcleo se puede desdoblar como la suma de las contribuciones de los protones y los neutrones a la energía total, i.e.,

$$E(N, Z, A; \beta_A) = E(N, A; \beta_A) + E(Z, A; \beta_A), \quad (4.1)$$

donde el parámetro β_A indica la deformación del potencial nuclear.

Por simplicidad, considérese únicamente el término de la energía correspondiente a los neutrones, $E(N, A; \beta_A)$. Este término se escribe

$$E(N, A; \beta_A) = E(N, A; \beta_A = 0) + CPD_N, \quad (4.2)$$

donde CPD_N es la corrección por deformación. Esta corrección es la diferencia entre la energía del sistema cuando se considera la deformación del potencial nuclear y la energía del sistema cuando no se toma en cuenta dicha deformación, i.e.,

$$CPD_N = E(N, A; \beta_A) - E(N, A)$$

La energía del núcleo sin deformación es

$$\begin{aligned} E(N) &= \sum_{n, e, j} [E_{neij} - \frac{1}{2} \nu_{neij}] N_{neij} \\ &= \sum_{i \in c.c.} [E_i - \frac{1}{2} \nu_i] N_i + \sum_{i \in c.a.} [E_i - \frac{1}{2} \nu_i] N_i, \end{aligned} \quad (4.3)$$

donde N_i es el número de neutrones en el i -ésimo nivel, el índice de la primera suma (c.c.) denota que ésta se lleva a cabo sobre las capas llenas y la suma cuyo rango es c.a. se realiza sobre la capa abierta. Llamando ω_i a los sumandos $E_i - \frac{1}{2} \nu_i$, esta expresión es

$$E(\lambda_M) = \sum_{i \in c.c.}^{\lambda_M} \omega_i N_i + \sum_{i \in c.a.}^{\lambda_T} \omega_i N_i, \quad (4.3')$$

sujeta a la condición

$$N(i_M) = \sum_{i \in c.c.}^{i_M} \omega_i N_i + \sum_{i \in c.a.}^{i_F} \omega_i N_i, \quad (4.4)$$

donde:

- a) i_M denota los números cuánticos asociados al número mágico η correspondiente a la última capa llena.
 b) i_F denota los números cuánticos del nivel de Fermi.

Definiendo

$$\mathcal{E}(i_M) = E(N) - \sum_{c.a.}^{i_F} \omega_i N_i = \sum_{c.c.}^{i_M} \omega_i N_i \quad (4.6)$$

y

$$\eta(i_M) = N - \sum_{c.a.}^{i_F} N_i = \sum_{c.c.}^{i_M} N_i, \quad (4.7)$$

se puede despejar $\mathcal{E}(i_M)$ en función del número mágico correspondiente a la última capa cerrada, $\mathcal{E} = \mathcal{E}(\eta)$. Esta expresión fue obtenida por J. Herrera ([He 79], p.p. 4.17-4.24); quien no sólo la usó para los núcleos mágicos, sino para toda la tabla nuclear, esto es,

$$\mathcal{E}(\eta) \longrightarrow \mathcal{E}(N)$$

Es claro que en un planteamiento más preciso, la energía, obtenida de la manera arriba indicada, debe compensarse incluyendo una corrección por llenamiento.

4.1) NIVELES DE ENERGIA DE PARTICULA INDEPENDIENTE.

En esta sección se obtiene la expresión para la energía de los niveles de partícula individual empleando el potencial de pozo cuadrado infinito ([He 79]).

$$V(r) = \begin{cases} -V & \text{si } r \leq R, \\ \infty & \text{si } r > R. \end{cases} \quad (4.7)$$

La ecuación de Schrodinger es

$$\nabla^2 \Psi(\vec{r}) + k^2 \Psi(\vec{r}) = 0, \quad (4.8)$$

donde

$$k^2 = \frac{2m_0}{\hbar^2} (e + V), \quad (4.9)$$

con las condiciones a la frontera $\Psi(0) = 0 = \Psi(R)$

Las soluciones de la ecuación de Schrodinger para la parte radial de la función de onda, son las funciones esféricas de Bessel que se cancelan en $r=0$ y $r=R$:

$$k_{ne} R = \left[\frac{2m_0}{\hbar^2} (e_{ne} + V) \right]^{1/2} R = \omega_{ne}, \quad (4.10)$$

donde ω_{ne} es el cero correspondiente a la función de Bessel.

Para representar ω_{ne} se puede emplear el desarrollo asintótico

$$\omega_{ne} = \left[\frac{n+2}{2} \pi - \frac{1}{2} \frac{l(l+1)}{\frac{1}{2}(n+2)\pi} \right] - \frac{1}{96} \frac{l(l+1)[28l(l+1)-24]}{\frac{n+2}{2} \pi^3} + \dots (4.11)$$

([GR 65]); en esta expansión, n se relaciona con el número de nodos (m) por

$$n = 2(m-1) + l. \quad (4.12)$$

Tomando únicamente los dos primeros términos del desarrollo y despejando e_{ne} de la ecuación (4.10), se obtiene

$$e_{ne} \approx -V + \frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} \left\{ \left(\frac{n+2}{2} \right)^2 \pi^2 - l(l+1) \right\}. \quad (4.13)$$

Ahora bien, en lugar de usar un potencial de pozo cuadrado infinito, es más adecuado considerar un pozo cuadrado finito. En este pozo, el espaciamento entre los niveles decrece con la energía, al contrario de lo que ocurre en el pozo infinito. Nótese que las soluciones de la ecuación de Schrodinger con un pozo cuadrado finito son aún las funciones esféricas de Bessel pero que, en lugar de anularse en R , se acoplan a una función de Neumann. Entonces, los niveles de energía para el pozo finito corresponden a los que se obtienen de funciones de onda que se anulan en radios R' mayores que R ; así, la expresión para la la

energía del nivel sigue siendo aproximadamente válida si se aumenta R en proporción a la energía. Se propone

$$R' = (r_0 + (\Delta r_0) n) A^{1/3} \quad (4.14)$$

Expandiendo $1/R'^2$ en un desarrollo de Taylor y reescribiendo $\Delta r_0/r_0$ como $\sigma A^{p/3}$, donde σ es un parámetro ajustable y p un entero menor o igual que -1, la energía del nivel se escribe

$$e_{nl} = -V + \frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} (1 - 2\sigma A^{p/3} n) \left\{ \left(\frac{l+2}{2}\right)^2 \pi^2 - l(l+1) \right\} \quad (4.15)$$

Ahora bien, el potencial debe incluir un término de interacción spin - órbita invertido:

$$V_{so} = -\frac{2}{\hbar^2} c \vec{l} \cdot \vec{s} = -c \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \quad (4.16)$$

([CDL 77]), donde el coeficiente C es

$$C = \hbar^2 \Delta (2m_0 R^2)$$

y Δ es un parámetro ajustable sin dimensiones, cuyo valor se obtiene de los rompimientos spin-órbita experimentales.

De lo anterior se concluye que la nueva expresión para los niveles de energía es

$$e_{nlj} = -V + \frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} (1 - 2\sigma A^{p/3} n) \times \left\{ \left(\frac{l+2}{2}\right)^2 \pi^2 - l(l+1) - \Delta \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \right\} \quad (4.17)$$

Finalmente, la profundidad del potencial V es la del potencial óptico fenomenológico que se acostumbra escribir en la misma forma que la de la ecuación (3.39). Además, ecuación (3.38), recuérdese que la relación entre los niveles de energía de la ecuación de Schrodinger con un potencial local (e_{nlj}) y los de la misma con el potencial no local, está dada por $\epsilon_i = \frac{m_0}{m^*} e_i$; por lo tanto, la expresión final para los niveles de energía es

$$E_{nlj} = \frac{m_0}{m^*} \left[-\left(V_0 + \sigma \frac{N-Z}{A} V_1 \right) + \frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} (1 - 2\sigma A^{P/3} n) \times \right. \\ \left. \times \left\{ \left(\frac{n+2}{2} \right)^2 \pi^2 - l(l+1) - \Delta [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \right\} \right] \quad (4.18)$$

2) FORMULA DE MASAS NUCLEARES

Una vez obtenidos los niveles de energía, ya se puede proceder a determinar una expresión para la energía de amarre. En esta sección se resumirá el desarrollo realizado por J. Herrera (He 79), para obtener dicha expresión.

Para lo anterior, Herrera empleó la expresión:

$$E = \sum_i t_i + \frac{1}{2} (1+d) \psi_i \quad (4.19)$$

donde

$$t_i = \frac{m_0}{m^*} \left[\frac{\hbar^2}{2m_0 r_0^2 A^{2/3}} (1 - 2\sigma n A^{P/3}) \left\{ \left(\frac{n+2}{2} \right)^2 \pi^2 - l(l+1) \right\} \right] \quad (4.20a)$$

$$= \frac{m_0}{m^*} \left[-\left(V_0 + \sigma \frac{N-Z}{A} V_1 \right) - \frac{\hbar^2}{2m_0 R^2} (1 - 2\sigma n A^{P/3}) \Delta [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \right] \quad (4.20b)$$

Esta expresión difiere de la que se encuentra del método de H-F en el término $\frac{d}{2} \sum \psi_i$. Este término fue introducido por Herrera para tomar en cuenta contribuciones de segundo orden al potencial común, en el esquema conocido como Brueckner-Hartree-Fock-renormalizado.

Herrera por simplicidad, realizó la suma (4.19) sólo para núcleos con capas cerradas. La expresión que obtuvo para la energía la utilizó sobre toda la tabla nuclear al realizar el ajuste de sus coeficientes, como se indicó en la introducción de este capítulo.

Para los neutrones (protones), Herrera separó la energía como

$$\mathcal{E}(N, A) = \mathcal{E}_N^{(1)} + \mathcal{E}_N^{(2)} + \mathcal{E}_N^{(3)}, \quad (4.21)$$

donde:

$$\mathcal{E}_N^{(1)} = -\frac{1}{2}(1+d) \frac{m_0}{m^*} (V_0 + \zeta V_1 \frac{N-2}{A}) N, \quad (4.22a)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_N^{(2)} = \frac{m_0}{m^*} \frac{\hbar^2}{2m_0 r_0^2 A^{2/3}} \left\{ \left(\frac{\pi^2}{20} - \frac{1}{10} \right) \eta^5 + \frac{\pi^2}{16} \eta^4 + \left[\left(\frac{\pi^2}{24} + \frac{1}{3} \right) - \right. \right. \\ \left. \left. - \gamma_1 \right] \eta^3 + \left[\frac{\pi^2}{48} + \gamma_1 \left(\frac{\pi^2}{2} + 2 - 2 \frac{\Delta(1+d)}{2} \right) \right] \eta^2 + \left[\left(\frac{\pi^2}{180} - \right. \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{1}{90} \right) + \gamma_1 \left(-\frac{5\pi^2}{12} + \frac{13}{3} + \frac{2\Delta(1+d)}{2} \right) \right] \eta + \gamma_1 \left[-\frac{25\pi^2}{12} + \frac{20}{3} \frac{\Delta(1+d)}{2} - \right. \\ \left. - \frac{20}{3} \right] \left. \right\}, \quad (4.22b) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_N^{(3)} = \frac{m_0}{m^*} \frac{\hbar^2}{2m_0 r_0^2 A^{2/3}} (-2\sigma A^{1/3}) \left\{ \left(\frac{\pi^2}{24} - \frac{1}{12} \right) \eta^6 + \left(-\frac{\pi^2}{40} + \frac{3}{20} \right) \eta^5 + \right. \\ \left. + \left(-\frac{\pi^2}{16} + \frac{1}{4} - \gamma_1 \right) \eta^4 + \left[\left(-\frac{\pi^2}{24} - \frac{1}{2} \right) + \gamma_1 \left(\frac{3\pi^2}{4} + \frac{5}{2} - 2 \frac{\Delta(1+d)}{2} \right) \right] \eta^3 + \right. \\ \left. + \left[\left(-\frac{\pi^2}{48} + \frac{1}{12} \right) + \gamma_1 \left(-\pi^2 + \frac{14}{3} + 4 \frac{\Delta(1+d)}{2} \right) \right] \eta^2 + \left[-\frac{\pi^2}{360} + \frac{1}{60} + \right. \right. \\ \left. \left. \gamma_1 \left(-\frac{11\pi^2}{3} - \frac{23}{2} + 8 \frac{\Delta(1+d)}{2} \right) \right] \eta + \gamma_1 \left(\frac{15\pi^2}{4} - \frac{98}{3} - \frac{40}{3} \frac{\Delta(1+d)}{2} \right) \right\}, \quad (4.22c) \end{aligned}$$

con $\eta = (3N)^{1/3}$ y

$$\gamma_1 = 0 = \gamma_0 \quad \text{si } N < 20 \quad (n < 1)$$

$$\gamma_1 = 0, \gamma_2 = 1 \quad \text{si } 20 < N < 50 \quad (n = 2)$$

$$\gamma_1 = 1 = \gamma_2 \quad \text{si } N > 50 \quad (n > 3).$$

Sumando (4.21) para protones y neutrones, y simplificando el resultado, Herrera obtuvo una expresión para la energía total del tipo

$$\mathcal{L}(N, \bar{z}, A) = \sum_{i=1}^4 \sum_{j=-2}^3 \sum_{k=0,2} [a_{ijk} T_i A^{j/3} \left(\frac{N-\bar{z}}{A}\right)^k - \sigma b_{ijk} T_i A^{(P_{1j})/3} \left(\frac{N-\bar{z}}{A}\right)^k], \quad (4.23)$$

que es lineal en las T_i por lo que se puede emplear el método de mínimos cuadrados para su ajuste. Las T_i son

$$T_1 = -\frac{1}{2} \frac{m}{m^*} V_0 (1+d), \quad (4.24a)$$

$$T_2 = T_1 \frac{V_1}{V_0} \left[\left(\frac{m^*}{m} - 1\right) \frac{V_1}{V_0} - \frac{m}{m^*} \right], \quad (4.24b)$$

$$T_3 = \frac{\hbar^2}{2m_0 v_0^2} \left(\frac{m}{m^*} - 1\right) \frac{V_1}{V_0} \quad (4.24c)$$

$$T_4 = T_3 \left(\frac{m}{m^*} - 1\right) \frac{V_1}{V_0} \quad (4.24d)$$

De las expresiones (4.24) se pueden despejar los parámetros V_1/V_0 , m_0/m^* , v_0^2 y $V_0(1+d)$.

La expresión (4.23) puede escribirse como

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(N, \bar{z}, A) = & -a_{2s} A + a_{5s} A^{2/3} - a_{6s} A^{1/3} + a_{4t} A^0 - a_{5s} A^{-1/3} + a_{6s} A^{-2/3} + \\ & + \left(\frac{N-\bar{z}}{A}\right)^2 [a_{05s} A - a_{55s} A^{2/3} + a_{65s} A^{1/3} + a_{45s} A^0 + \\ & + a_{55s} A^{-1/3} - a_{65s} A^{-2/3}] + E_c + E_p. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Las expresiones para E_c y E_p son:

$$E_c = a_d \frac{\bar{z}^2}{A^{1/3}} (1 - 0.7636 \bar{z}^{2/3} - 1.641 A^{-2/3}) \quad (4.26)$$

$$E_p = \begin{cases} 0 & \text{para los núcleos par-par} \\ \Delta_p & \text{para los núcleos con N par - Z impar} \\ \Delta_n & \text{para los núcleos con N impar - Z par} \\ \Delta_n + \Delta_p & \text{para los núcleos impar - impar} \end{cases} \quad (4.27a)$$

donde

$$\Delta_n = \Delta_p = 12 A^{-1/2} \text{ MeV.} \quad (4.27b)$$

Para ilustrar lo expuesto hasta aquí, en la figura (4.1) se muestra la diferencia entre la energía de amarre obtenida de la fórmula de masas ajustada y la energía de amarre experimental. Para realizar el ajuste, los valores que se escogieron a priori fueron: $V_0 = 1.352$, $a_c = 0.69$ y $\sigma = 0.65$. Los valores de las T_i 's que generó el ajuste fueron:

$$T(1) = -32.15621,$$

$$T(2) = 13.70659,$$

$$T(3) = 12.13010$$

y

$$T(4) = 0.27835.$$

La desviación fue de 2.79 MeV. Sustituyendo estos valores en las expresiones (4.24), se obtiene que

$$V_1/V_0 = 0.412775,$$

$$r_0^2 = 1.803804,$$

$$m/m^* = 1.055593$$

y

$$V_0(1+d) = 60.925400.$$

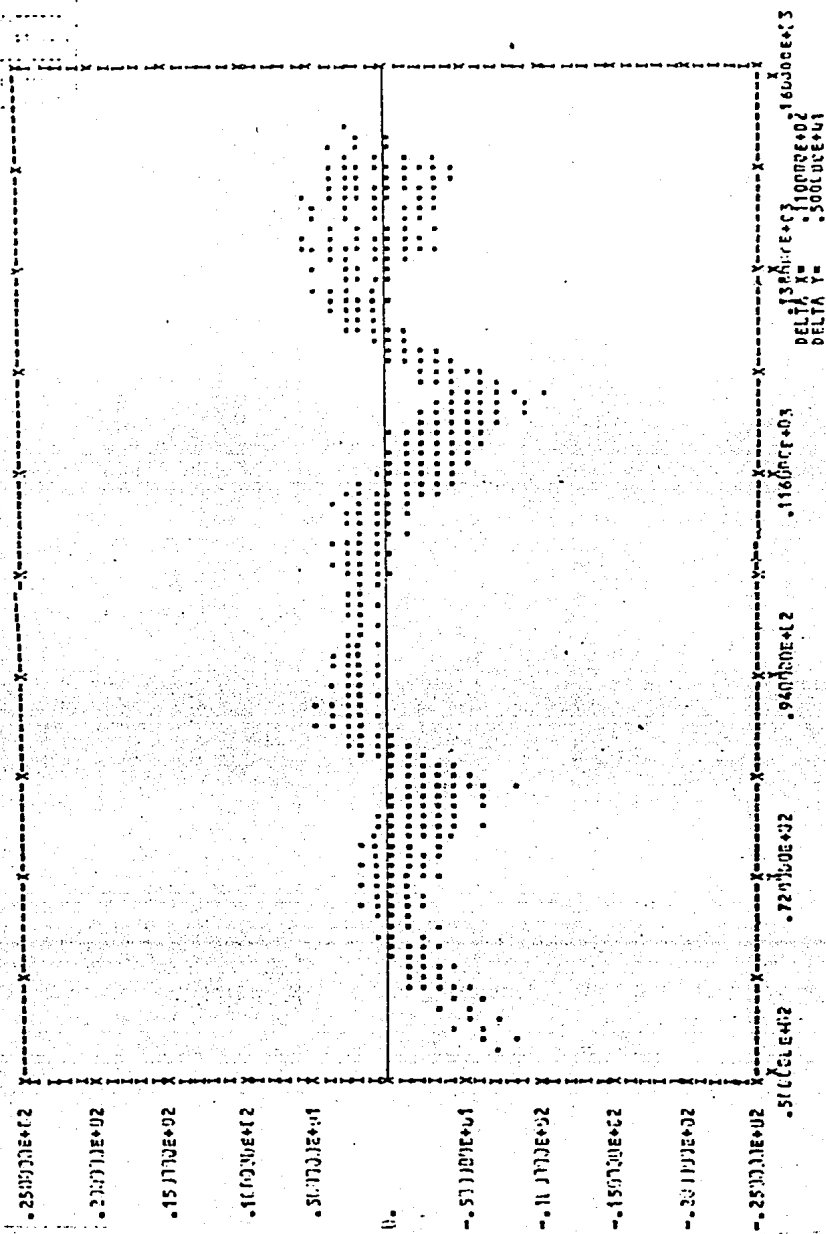


FIGURA 4.1. Diferencia entre la energía de amarre teórica y la energía de amarre experimental (en Mev) en función del número de neutrones. Nótese que los núcleos que corresponden a números mágicos, presentan una energía de amarre mayor que la esperada.

CAPITULO 5

CORRECCIONES POR LLENAMIENTO Y DE MASA EFECTIVA

En este capítulo se definen las correcciones por llenamiento parcial de capas y la de masa efectiva.

La energía total del núcleo es

$$\begin{aligned}
 E(N) &= \mathcal{E}(\lambda_M) + \sum_{c.a.}^{i_F} \omega_i N_i = \mathcal{E}(\eta) + \sum_{c.a.}^{i_F} \omega_i N_i \\
 &= \mathcal{E}(N) + \left[\mathcal{E}(\eta) + \sum_{c.a.}^{i_F} \omega_i N_i - \mathcal{E}(N) \right] \\
 &\equiv \mathcal{E}(N) + CPLL(N),
 \end{aligned}$$

donde \mathcal{E} , λ_M , η y ω_i se definen de la misma manera que en el capítulo anterior y la corrección por llenamiento (CPLL) se define como la diferencia

$$CPLL(N) \equiv E(N) - \mathcal{E}(N) = -\mathcal{E}(N) + \mathcal{E}(\eta) + \sum_{c.a.}^{i_F} \omega_i N_i. \quad (5.1)$$

De esta expresión se tiene que si $N = \eta$, es decir, si el núcleo es mágico, entonces $CPLL = 0$ ya que N_i , el número de partículas en la siguiente capa, es nulo. Si $N = \eta^*$, el siguiente número mágico, también $CPLL = 0$ ya que $\mathcal{E}(\eta) + \sum \omega_i N_i$ es igual a $\mathcal{E}(\eta^*)$ y además, esta relación funcional es en principio "exacta" para los núcleos mágicos.

Para una sola partícula en la capa abierta se tiene que

$$CPLC(\eta+1) = \mathcal{E}(\eta) + \omega_{inf} - \mathcal{E}(\eta+1) \\ \approx \mathcal{E}(\eta) + \omega_{inf} - \left[\mathcal{E}(\eta) + \left. \frac{\partial \mathcal{E}(\omega)}{\partial N} \right|_{N=\eta} + \dots \right]$$

entonces

$$CPLC(\eta+1) \approx \omega_{inf} - \left. \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial N} \right|_{N=\eta}$$

donde el segundo término del miembro derecho se puede identificar como la energía de separación.

Antes de proceder a evaluar la expresión para la corrección por llenamiento, es conveniente incorporar explícitamente un efecto de segundo orden en perturbación que se denominará corrección de masa efectiva (CMEF) y que se explica a continuación.

En el capítulo 3 se vió que el efecto de la no localidad se puede representar con un factor multiplicativo común M_e/M^* , en general mayor que uno, en los niveles de energía de partícula independiente que se obtienen del potencial local. Ahora bien, diversas investigaciones ([BHQ 82]) que toman en cuenta correcciones perturbativas de segundo orden, muestran un efecto de cancelación en el nivel de Fermi para el cual la masa efectiva se hace prácticamente igual a la masa real. A la diferencia en la contribución de la capa en llenamiento a la energía total, cuando se considera una masa efectiva igual a la real, se denominará corrección de masa efectiva.

En función de lo anterior, la expresión correcta para la energía total es

$$\mathcal{E}(N) = \sum_{c.c.}^{iM} \omega_i N_i + \sum_{c.a.}^{iF} \frac{M^*}{m_0} \omega_i N_i, \quad (5.2)$$

en lugar de

$$E(N) = \sum_{c.c.}^{iM} \omega_i N_i + \sum_{c.a.}^{iF} \omega_i N_i. \quad (5.3)$$

La expresión (5.2) se puede reescribir como

$$\mathcal{E}(N) = \sum_{c.c.}^{\omega_u} \omega_i N_i + \sum_{c.a.}^{\omega_T} \omega_i N_i + \sum_{c.a.}^{\omega_T} \left(\frac{m^*}{m_0} - 1\right) \omega_i N_i$$

$$= E(N) + CMEF(N)$$

donde la corrección de masa efectiva es

$$CMEF(N) = \sum_{c.a.}^{\omega_T} \left(\frac{m^*}{m_0} - 1\right) \omega_i N_i = \sum_{c.a.} \left(f(\omega_i) - 1\right) \omega_i N_i; \quad (5.4)$$

nótese que en general, el cociente m^*/m_0 es función del nivel; sin embargo, en primera aproximación, lo consideraremos constante.

5.1 ENERGIA DE LA ULTIMA CAPA

Para calcular la corrección por llenamiento y la corrección de masa efectiva, es necesario evaluar primero la energía de la última capa, es decir, la suma $\sum_{c.a.} \omega_i N_i$; para esto, la suma se aproxima mediante una integral

$$\sum_{c.a.}^{\omega_T} \omega_i N_i \longrightarrow \int_{\omega_m}^{\omega} de \rho(e),$$

donde ρ representa el número de partículas por nivel de energía y ω_m es el nivel inferior de la última capa. Esta aproximación se hace con las siguientes constricciones:

$$a) \int_{\omega_m}^{\omega_u} de \rho(e) = \eta^* - \eta, \quad (5.5a)$$

donde η^* es el número mágico correspondiente a la capa abierta, η es el número mágico correspondiente a la última capa cerrada y ω_m es el nivel superior de la última capa.

$$b) \int_{\omega_m}^{\omega_u} de e \rho(e) = \mathcal{E}_N(\eta^*, A) - \mathcal{E}_N(\eta, A), \quad (5.5b)$$

es decir, la integral sobre toda la capa del nivel de energía multiplicado por la densidad debe ser igual a la contribución a la energía total proveniente de la última capa, si esta estuviera llena. El subíndice N indica que las energías para η^* y η se deben de evaluar en el pozo de potencial correspondiente a N y no

en los pozos correspondientes a η^* y η

Se propone que la densidad sea lineal

$$\rho(\omega) = m(\omega - \omega_m) + b, \quad (5.6)$$

donde m y b se determinan a partir de las constricciones.

Al sustituir la densidad en las ecuaciones (5.5), se obtienen las relaciones:

$$\frac{m}{2}(\omega_M - \omega_m)^2 + b(\omega_M - \omega_m) = \eta^* - \eta \quad (5.7a)$$

y

$$\frac{m}{3}(\omega_M - \omega_m)^3 + \frac{m}{2}\omega_M(\omega_M - \omega_m)^2 + \frac{b}{2}(\omega_M^2 - \omega_m^2) = \mathcal{E}_N(\eta^*) - \mathcal{E}_N(\eta). \quad (5.7b)$$

Despejando m y b de (5.7a) y (5.7b) se obtienen

$$m = 12 \frac{\mathcal{E}_N(\eta^*) - \mathcal{E}_N(\eta) - \frac{\eta^* - \eta}{2}(\omega_M + \omega_m)}{(\omega_M + \omega_m)^3} \quad (5.8a)$$

y

$$b = \frac{\eta^* - \eta}{\omega_M - \omega_m} - \frac{m}{2}(\omega_M - \omega_m) \quad (5.8b)$$

Ahora se evaluará la suma $\sum_{i=1}^N \omega_i N_i$. Para esto, el número de partículas de la última capa hasta el nivel se denotará como $\mathcal{N}(\omega)$ y la energía de la última capa hasta el nivel ω se denotará por $\mathcal{E}(\omega)$.

El número de partículas hasta el nivel ω es

$$\mathcal{N}(\omega) = \int_{\omega_m}^{\omega} d\epsilon \rho(\epsilon) = \frac{m}{2}(\omega - \omega_m)^2 + b(\omega - \omega_m), \quad (5.9a)$$

y la energía de la última capa hasta el nivel es

$$\mathcal{L}(\omega) = \int_{\omega_m}^{\omega} d\epsilon \rho(\epsilon) = \frac{m}{3} (\omega - \omega_m)^3 + \frac{m}{2} \omega_m (\omega - \omega_m)^2 + \frac{b}{2} (\omega^2 - \omega_m^2). \quad (5.9b)$$

En las ecuaciones (5.9) se tiene $\mathcal{N} = \mathcal{N}(\omega)$ y $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\omega)$; pero, para realizar los cálculos, lo adecuado es tener $\mathcal{L} = \mathcal{L}(\mathcal{N})$. Ahora, la ecuación (5.9a) se puede reescribir como

$$\frac{m}{2} (\omega - \omega_m)^2 + b(\omega - \omega_m) - \mathcal{N} = 0$$

o equivalentemente,

$$\frac{m}{2} \Delta^2 + b\Delta - \mathcal{N} = 0 \quad (5.10)$$

donde Δ se define como la diferencia $\omega - \omega_m$. De (5.10) se obtiene que

$$\Delta = \frac{-b \pm \sqrt{b^2 + 2m\mathcal{N}}}{m} \quad (5.11)$$

Sin embargo, Δ y ρ deben ser positivos y, en particular, $\rho(\omega_m) = b$ debe ser mayor que cero. De lo anterior se infiere que el signo adecuado de (5.11) es el positivo.

De (5.9) y (5.10) se obtiene que el incremento de la energía en función del número de partículas es

$$\begin{aligned} \mathcal{L}(\mathcal{N}) &= \frac{m}{3} \Delta^3 + \frac{m}{2} \Delta^2 \omega_m + \frac{b}{2} (\omega + \omega_m) \Delta \\ &= \frac{m}{3} \Delta^3 + \frac{m}{2} \Delta^2 \omega_m + \frac{b}{2} \Delta (\Delta + 2\omega_m); \end{aligned}$$

pero, ecuación (5.10), $\frac{m}{2} \Delta^2 + b\Delta = \mathcal{N}$, entonces

$$\mathcal{L}(\mathcal{N}) = \frac{m}{3} \Delta^3 + \mathcal{N} \omega_m + \frac{b}{2} \Delta^2, \quad (5.12)$$

En función de $\mathcal{E}(W)$, la corrección por llenamiento parcial de capas y la corrección de masa efectiva se expresan como:

$$CPLL = [\mathcal{E}(\eta) - \mathcal{E}(N)] + \mathcal{E}(W) \quad (5.13a)$$

y

$$CMEF = \left(\frac{m^*}{m_0} - 1 \right) \mathcal{E}(W), \quad (5.13b)$$

donde el cociente m^*/m_0 es constante para cada tipo de nucleones en un núcleo dado.

5.2) CALCULO Y RESULTADOS.

En esta sección se describe la forma en que el cálculo se realiza. Dados N y Z , se hace lo siguiente:

I) Se seleccionan los valores de los parámetros V_0 , V_1 , σ , r_0 , m/m^* , d , Λ . Los valores de estos parámetros para el

I.1) $V_0 = 52.45 \text{ MeV}$

I.2) $V_1 = 21.98 \text{ MeV}$

I.3) $r_0 = 1.35 \text{ F}$

I.4) $P = -2$, $\sigma = 0.65$ y $a_c = 0.69 \text{ MeV}$

I.5) $\frac{m_0}{m^*} = 1.06$

I.6) $d = 0.15$

I.7) $\Lambda = \frac{2m_0c^2}{(\hbar c)^2} \frac{r_0^2}{m/m^*} \text{ K}$, donde $K \approx 8.86 \text{ MeV}$.

II) Se determinan los parámetros de las capas en las que se encuentran N y Z , es decir, η^* , η , n_{sup} , n_{inf} , l_{sup} , l_{inf} , j_{sup} y j_{inf} , donde n , l y j con el subíndice sup y el subíndice inf son los números cuánticos asociados con el nivel superior y con el nivel inferior de la última capa respectivamente. Esto se hace en base a la siguiente tabla:

η^*	=	50	.	82	.	126	.	184
n_{sup}	=	4	.	5	.	5	.	6
l_{sup}	=	4	.	5	.	1	.	0
j_{sup}	=	9/2	.	11/2	.	1/2	.	1/4
η	=	20	.	50	.	82	.	126
n_{inf}	=	2	.	4	.	5	.	6
l_{inf}	=	2	.	2	.	5	.	6
j_{inf}	=	3/2	.	7/2	.	9/2	.	11/2

TABLA 5.1

III) Con los resultados de los pasos que se indican en los incisos anteriores, se procede a calcular los valores de ω_m y ω_M (ecuación (4.19)) y además se determinan los cocientes $(M_0/M^*)_p$ y $(M_0/M^*)_n$, de acuerdo con la expresión (3.52). Después se determinan, ecuaciones (4.23), $\mathcal{E}_{N(z)}(\eta^*, A)$, $\mathcal{E}_{N(z)}(N(z), A)$, $\mathcal{E}_{N(z)}(\eta, A)$

IV) Con los valores de las energías totales y los niveles de energía, se evalúan la pendiente (m) y la ordenada al origen (b) de la densidad de nucleones por nivel de energía, como se indica en las ecuaciones (5.8). Ahora bien, algunos valores de la ordenada, calculados con los datos del párrafo III, resultan ser negativos; esto es contrario al significado de la densidad, ecuación (5.6), ya que la densidad debe ser positiva. La manera en que esto se corrige es ensanchando la última capa hasta que $b > 0$, es decir

$$\omega_M \longrightarrow \omega'_M = \omega_M + 2\delta$$

$$\omega_m \longrightarrow \omega'_m = \omega_m - \delta$$

(en la práctica, el ensanchamiento total varió entre 0 y 3 MeV). Esto es razonable, ya que al sustituir la suma por la integral, la función ω_i que es discreta, se transforma en una función continua que se debe "suavizar" en los extremos (ω_m y ω_M). El nivel superior se ensancha más que el inferior debido a que al final de la capa, el número de nucleones por nivel de energía es mayor que al principio de la misma.

V) Finalmente, se determina el valor de la variable Δ el valor de la energía de la última capa, la corrección por llenamiento y la corrección de masa efectiva como se indica en las expresiones (5.13).

En las figura (5.1a), (5.1b), (5.2a) y (5.2b) se muestran las gráficas de la corrección por llenamiento de capas para neutrones, la corrección por llenamiento de capas para protones, la corrección de masa efectiva para neutrones y la corrección de masa efectiva para protones, respectivamente. Los parámetros empleados para obtener estas gráficas son los que se usaron para obtener el ajuste que se grafica en la figura (4.1). El ajuste global de la fórmula de masas nucleares, que incluye las correcciones por llenamiento y de masa efectiva, se ilustra en la figura (5.3); nótese la diferencia entre esta figura y la figura (4.1). Los valores de los parámetros empleados para realizar el ajuste son:

$$r_0 = 1.352,$$

$$Q_c = 0.69$$

y

$$\sigma = 0.65.$$

Los valores de las T_i 's que se obtienen con estos parámetros son:

$$T(1) = -32.84695,$$

$$T(2) = 57.35403,$$

$$T(3) = 12.49635$$

y

$$T(4) = 11.47196.$$

En base a estos valores, se obtiene que

$$V_1/V_0 = 10.10152,$$

$$r_0^2 = 1.80946,$$

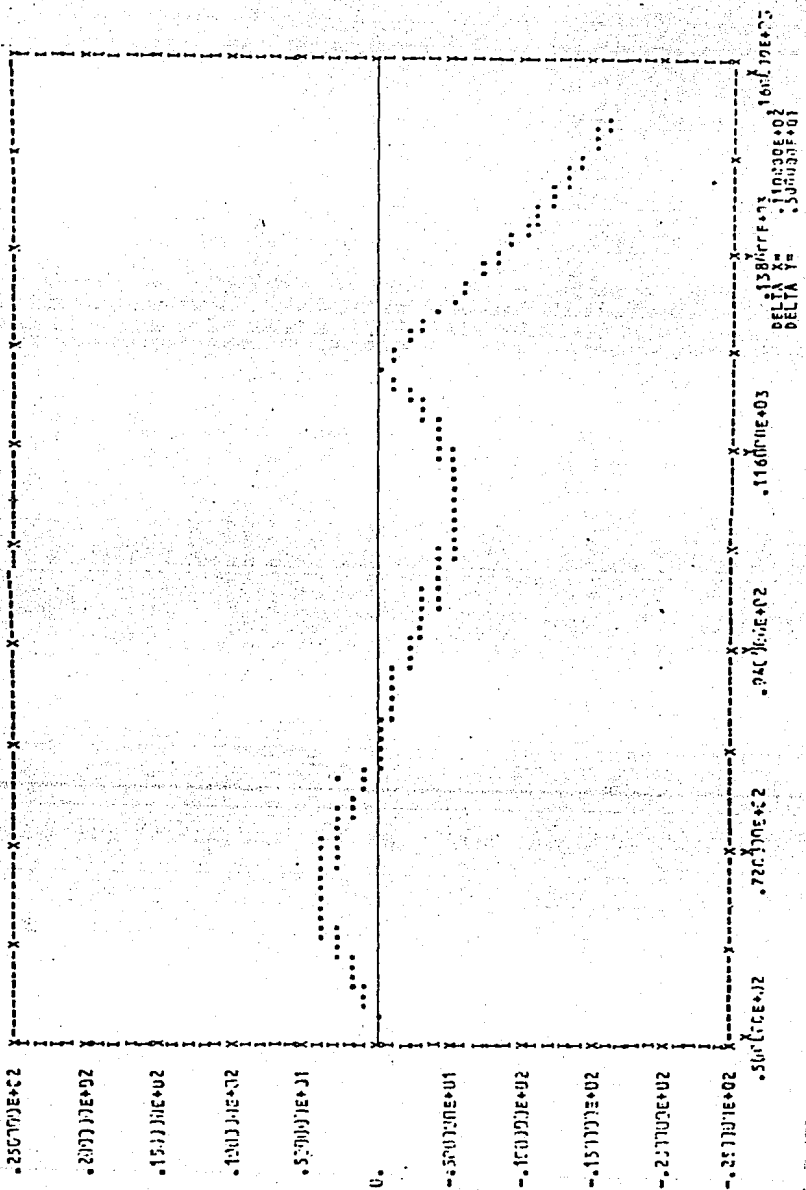
$$m/m^* = 1.09088$$

y

$$V_0(1+d) = 60.22100.$$

Nótese que a excepción de V_1 , estos valores son comparables con los que se obtienen del ajuste graficado en la figura (4.1). Finalmente, la desviación que se obtiene en este caso es de 6.87 MeV, valor mucho mayor que el que se obtiene de la fórmula de Herrera.

En la siguiente sección se discute porqué, en lugar de mejorar el ajuste, las correcciones introducidas a la fórmula de masas generan una mayor desviación con respecto a los resultados experimentales.



FIGURA(5.1a). Gráfica de CPLL(N) contra N. Obsérvese que esta corrección se anula en los números mágicos tal como se esperaba.

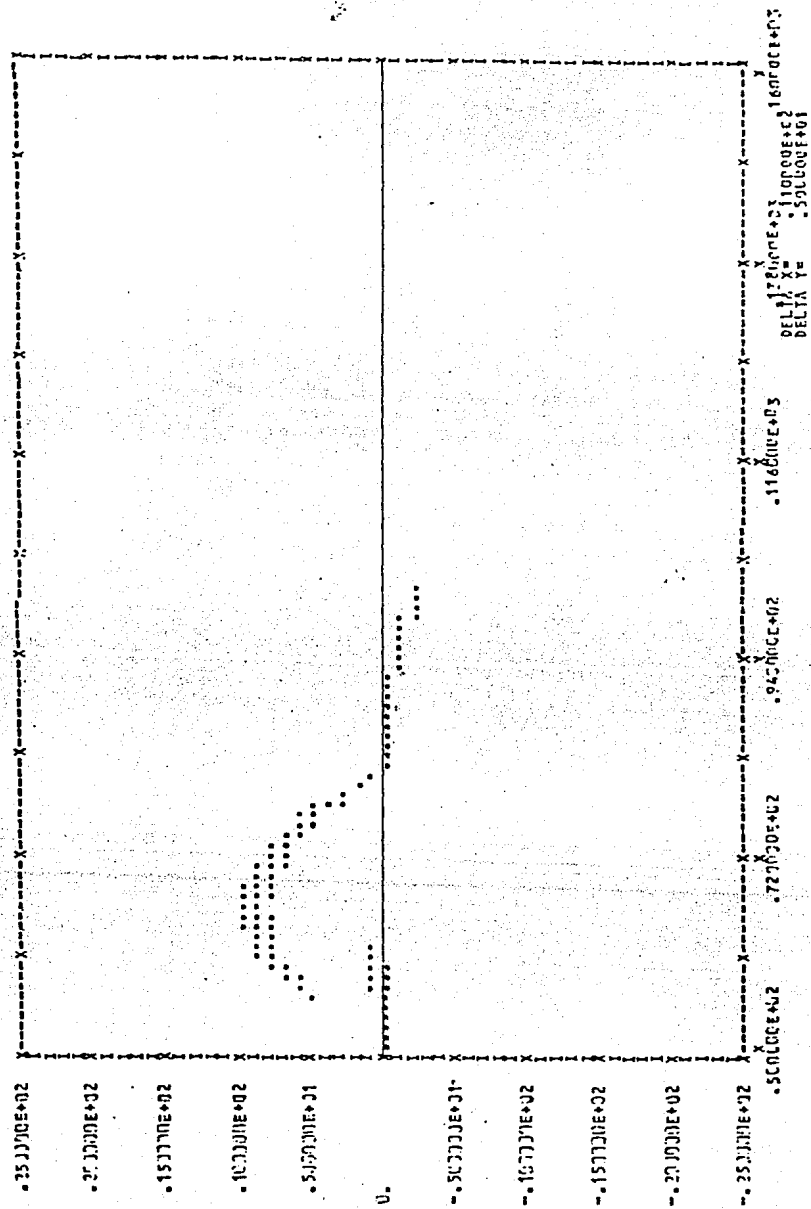


FIGURA (5.1b). Gráfica de CPLL(Z) contra Z.

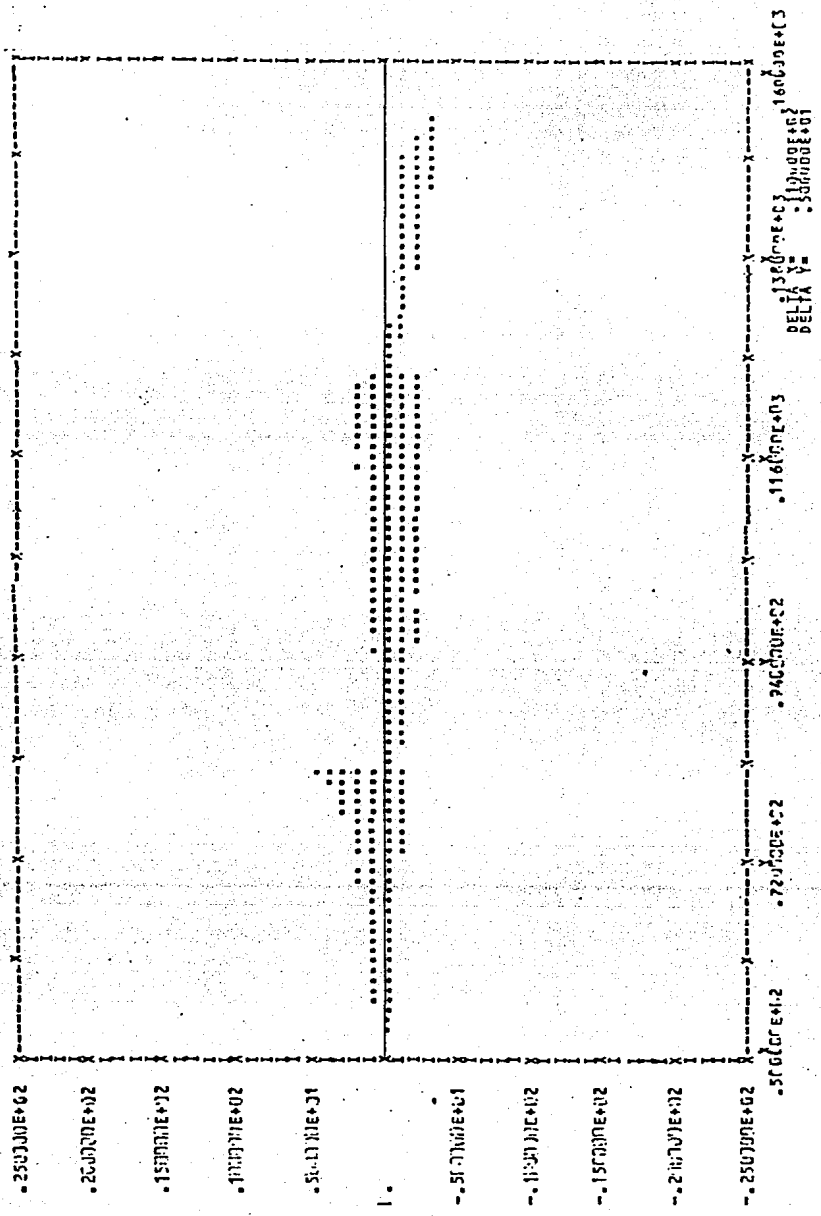


FIGURA (5.2a). Gráfica de CMEF(N) contra N.

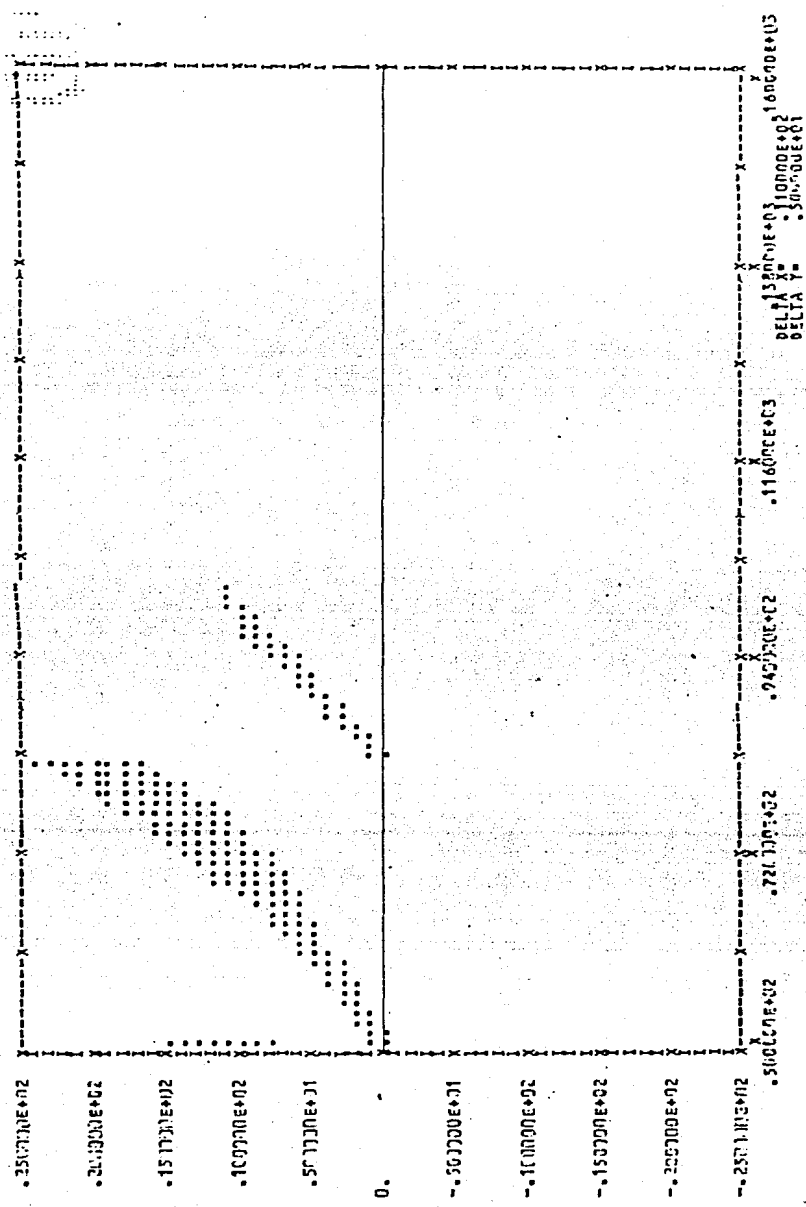


FIGURA (5.2b). Gráfica de CMEF(Z) contra Z.

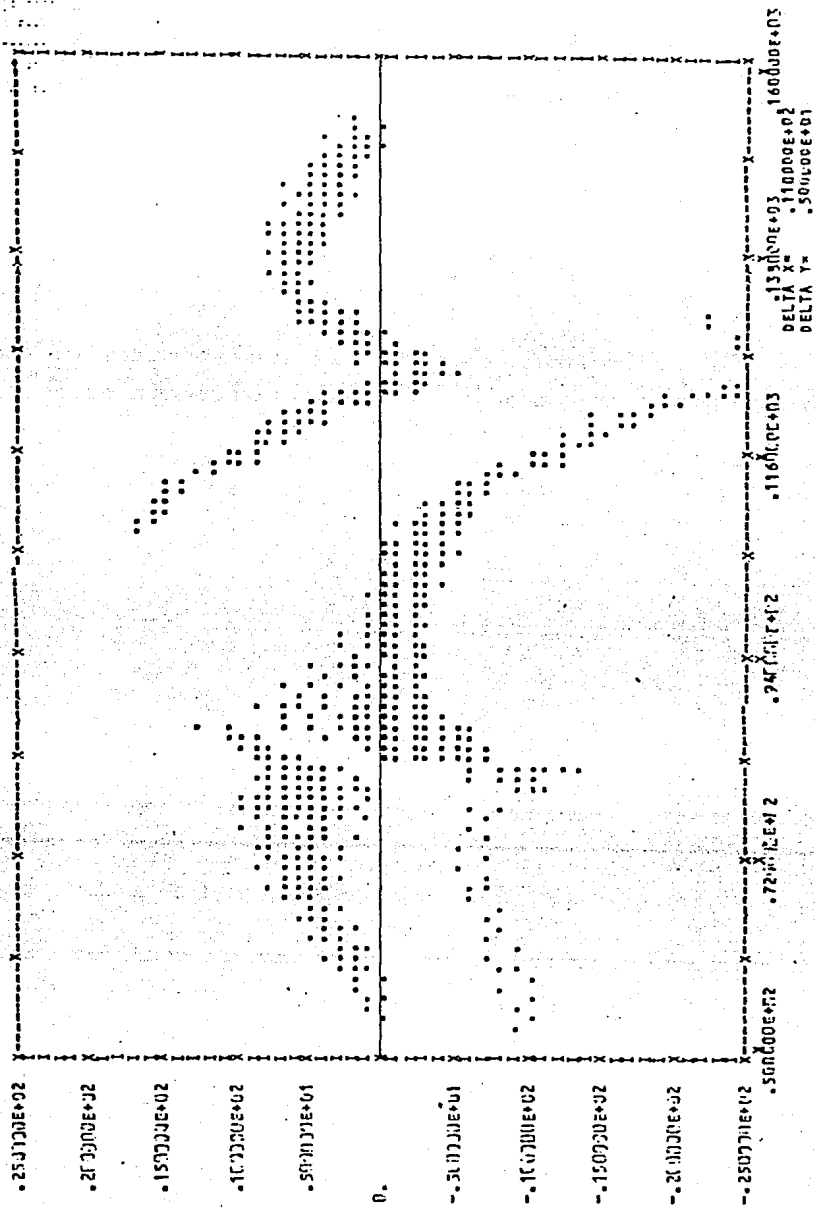


FIGURA (5.3). Gráfica del ajuste global contra el número de neutrones.

5.3) DISCUSION.

a) EXPECTATIVAS.

En términos de la energía de amarre, $BE(N,Z)$, la expectativa de que las correcciones mejoren el ajuste de la fórmula de masas con los datos experimentales, es que estos términos disminuyan el valor teórico B_t . En efecto, la expresión algebraica utilizada por Herrera et al. debería en principio ser exacta para los núcleos mágicos. Por lo tanto, al utilizar estas expresiones para núcleos diferentes de los mágicos, era de esperarse una sobreestimación, i.e., $B_t - B_e \geq 0$. El hecho de que en la figura (4.1) aparezcan diferencias tanto positivas como negativas se debe a que se hizo un ajuste por mínimos cuadrados, lo cual permitía la comparación con los ajustes de la fórmula de Bethe - Weizsacker. La congruencia con el planteamiento teórico requiere sin embargo un mínimo ajuste de los parámetros, de manera que el cero se desplace hacia los mínimos que ocurren en los números mágicos. En este caso, todas las diferencias serán positivas.

En vista de lo anterior, las correcciones a la energía total tanto la de llenamiento de capas como la de masa efectiva, deberían ser positivas.

Considérese primero la corrección por llenamiento de capas. Esta corrección se define como

$$C_{PLL} = [\mathcal{E}(\eta) - \mathcal{E}(N)] + \sum_{c.a.} \omega_i N_i$$

Ya que el valor de la energía total aumenta conforme el número de nucleones se incrementa, es de esperarse que la contribución de la última capa a la energía, $\sum \omega_i N_i$, sea negativa. De manera análoga, dado que $\eta \leq N$, la diferencia $\mathcal{E}(\eta) - \mathcal{E}(N)$ debería ser positiva y mayor en valor absoluto que la contribución de la última capa a la energía. Esto último daría lugar a que la corrección por llenamiento fuera positiva y pequeña. De la figura (5.1) se ve que lo anterior no ocurre, especialmente cuando N y Z son grandes. Una comprobación de que el cálculo se realiza correctamente es que las correcciones por llenamiento se hacen cero en los números mágicos, tal como se sigue de su planteamiento teórico.

Ahora, la diferencia $(m^*/m - 1)$ es negativa y además se espera que la contribución de la última capa a la energía sea negativa; por lo tanto, la corrección de masa efectiva debe tener signo positivo. Así, de lo anterior y de la definición, se tiene que la corrección de masa efectiva debe anularse en los números

lugar a un comportamiento de diente de sierra como el que se observa en las figuras (5.2); sin embargo, los valores numéricos de las alturas de las discontinuidades resultan ser demasiado grandes comparados con las diferencias entre la energía de amarre teórica y la experimental.

Vemos por lo tanto que las expectativas no se están cumpliendo.

b) ANALISIS DE LA PROBLEMÁTICA.

Para tener una idea acerca de lo que está generando el problema considérese el núcleo η . Para este núcleo se tiene lo siguiente:

	NEUTRONES	PROTONES
$E(\eta) - E(N) =$	-37.00	91.00
$\sum_{c.a.} \omega_i N_i =$	28.14	-91.81
CPLL =	- 8.91	- 0.46
CMEF =	- 1.48	5.73

En la tabla (5.2) se muestra el comportamiento de la energía total para neutrones en el pozo de potencial correspondiente al núcleo en consideración, conforme el número de neutrones se varía. En la tabla (5.3) se hace lo mismo para protones y se incluye la energía de Coulomb (E_c). En la figura (5.4) se esquematizan los resultados que se presentan en estas tablas.

En la gráfica (5.4) se observa que la energía total aumenta, en valor absoluto, hasta un valor máximo, a partir del cual decrece. Debido a esto se tiene que el valor de la diferencia $E_N(\eta) - E_N(N)$ es:

a) POSITIVO Y GRANDE, (grande en el sentido de que su valor es mayor que el valor absoluto de la suma $E_N(\eta) + E_N(N)$). En este caso el valor de la corrección por llenamiento es positivo, tal y como se requiere; esto ocurre cuando η y N están en la porción de la curva con pendiente negativa.

b) POSITIVA Y PEQUEÑA. Esto da lugar a que el valor de la corrección por llenamiento sea negativo y ocurre, por ejemplo, si la pendiente del punto de la curva que le corresponde a η es negativa, la pendiente del punto de la curva que le corresponde a N es positiva y la energía total asociada con N es menor que la asociada con η .

c) NEGATIVA. Si a η le corresponde el mínimo o la porción de la curva con pendiente positiva y a N le corresponde un punto con pendiente positiva, entonces la diferencia será positiva y esto da lugar a que la corrección por llenamiento sea negativa.

Específicamente, la contribución promedio de los neutrones se vuelve positiva a partir de $N = 110$ y se tiene que $\sum_{i=1}^N \omega_i N_i > 0$, dando lugar a los resultados numéricos expuestos.

N	$\mathcal{E}(N)$ (MeV)	\mathcal{E}_N/N (MeV)	$\Delta\mathcal{E}_N/\Delta N$ (MeV)
50	- 807.8	- 16.2	
60	- 896.5	- 14.9	- 8.87
70	- 967.1	- 13.8	- 7.06
82	- 1029.8	- 12.6	- 5.22
90	- 1059.0	- 11.8	- 3.65
100	- 1082.3	- 10.8	- 2.33
110	- 1091.6	- 9.9	- 0.93
120	- 1087.5	- 9.1	0.41
130	- 1070.7	- 8.2	1.42
140	- 1041.7	- 7.4	2.90
150	- 1000.9	- 6.7	4.08
160	- 948.9	- 5.9	5.20
170	- 886.0	- 5.2	6.29
180	- 812.5	- 4.5	7.35
184	- 780.3	- 4.2	8.05

N = 140, Z = 92

TABLA 5.2

Z	$\mathcal{E}(Z)$ (MeV)	\mathcal{E}_Z/Z (MeV)	$\Delta\mathcal{E}_Z/\Delta Z$ (MeV)
50	- 1045.3	- 21.9	
60	- 1240.7	- 20.7	- 14.54
70	- 1367.9	- 19.5	- 12.72
82	- 1498.1	- 18.3	- 10.85
92	- 1589.4	- 17.3	- 9.13
100	- 1651.7	- 16.5	- 7.79
110	- 1716.8	- 15.6	- 6.51
120	- 1768.5	- 14.7	- 5.17

N = 140, Z = 92

TABLA 5.3
(Primera parte)

Z	E_c (MeV)	$\mathcal{E}_z + E_c$ (MeV)	$(\mathcal{E}_z + E_c) / z$ (MeV)	$\Delta(\mathcal{E}_z + E_c) / \Delta z$ (MeV)
50	252.7	- 842.6	- 16.9	
60	366.5	- 874.2	- 14.6	- 3.15
70	501.6	- 866.3	- 12.4	0.79
82	691.7	- 806.4	- 9.8	4.99
92	873.5	- 715.8	- 7.8	9.06
100	1034.3	- 617.3	- 6.2	12.31
110	1254.5	- 462.3	- 4.2	15.50
120	1496.0	- 272.5	- 2.3	18.98

TABLA 5.3
(Segunda parte)

En el hecho de que la energía de amarre aumenta hasta alcanzar un máximo y que después de éste disminuya, reside la causa principal del comportamiento inesperado de las correcciones por llenamiento y de masa efectiva.

El origen de este efecto es el siguiente: El fundamento teórico del modelo de capas es el método de Hartree - Fock; en este método, las energías de partícula independiente se obtienen al sustituir el potencial promedio en la ecuación de Schrodinger. Sin embargo, ya que al determinar el potencial promedio se está tomando en cuenta dos veces la interacción entre los nucleones, la energía total no se obtiene simplemente sumando los niveles de partícula independiente, sino que se obtiene como la suma sobre la energía cinética de la partícula y un medio de la energía potencial, i.e.,

$$\mathcal{E}_N = \sum (t_i + \frac{1}{2}V_i) = \frac{1}{2} \sum (\epsilon_i + t_i),$$

donde t_i y V_i son la energía cinética y la energía potencial de partícula individual respectivamente. Nótese que $t_i > 0$ y $V_i < 0$.

Es claro que aunque para todo estado ligado $\epsilon_i = t_i + V_i < 0$, i.e., $t_i < |V_i|$, para los últimos niveles ocupados puede ocurrir que $t_i > \frac{1}{2}|V_i|$ y, por lo tanto, $t_i + \frac{1}{2}V_i > 0$. De esto se tiene que para un pozo de potencial dado, a partir de un cierto nivel, la acción de agregar partículas disminuye, en valor absoluto, la energía total, dando lugar a los mínimos que se observan en la figura (5.4). Este es pues, el mecanismo de saturación subyacente a nuestro problema.

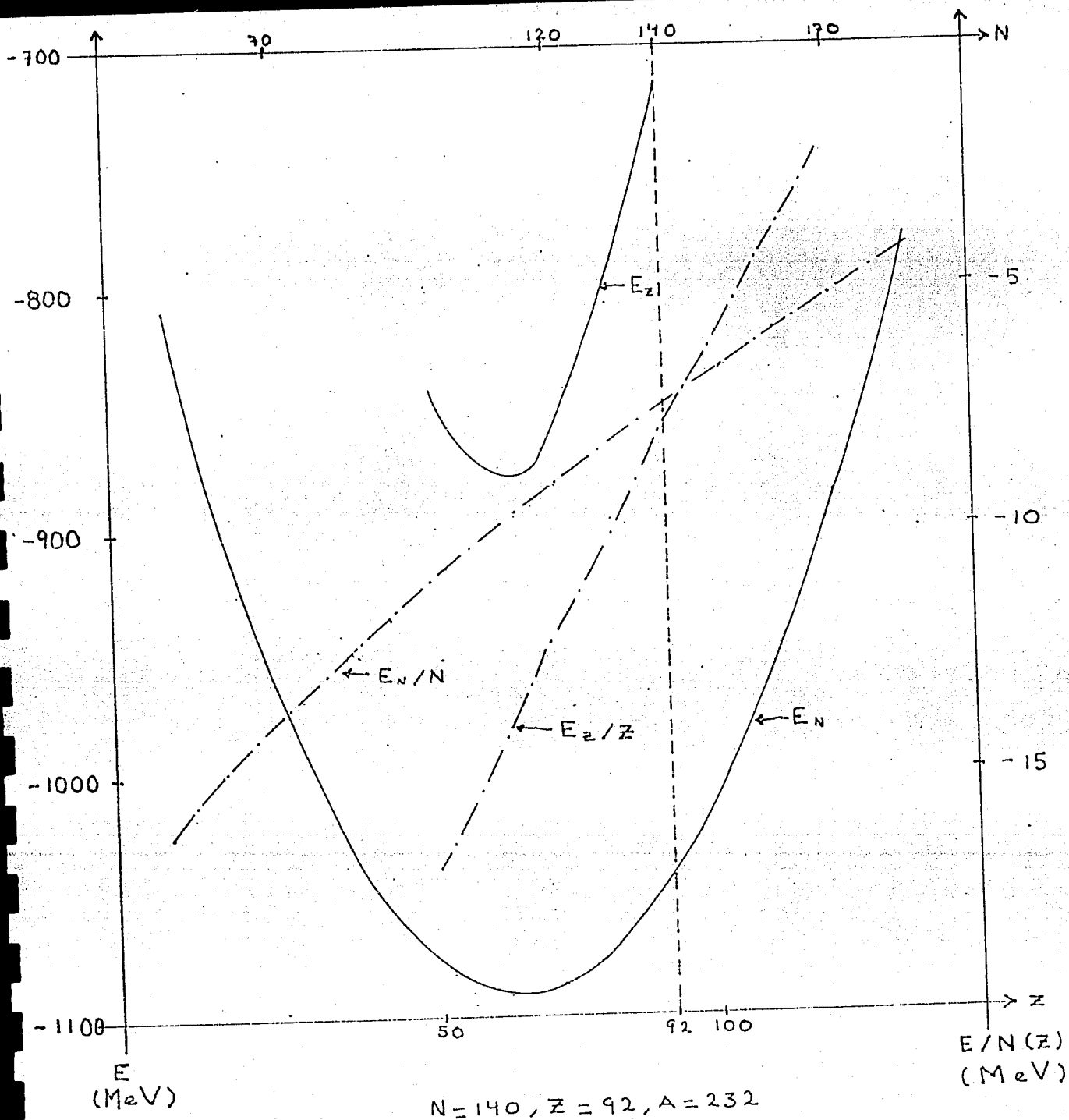


FIGURA (5.4)

En este punto es conveniente hacer algunos comentarios referentes a la corrección de masa efectiva. La corrección de masa efectiva se definió como

$$CMEF = \sum_{c.a.}^{\lambda_f} \left(\frac{M^*}{M_0}(\omega_i) - 1 \right) \omega_i N_i ;$$

pero el valor de la función $M^*(\omega_i)$ lo hemos considerado constante para cada tipo de nucleón de un núcleo dado. En lugar de esto, lo correcto es emplear una función suave y continua en la capa abierta.

El hecho de haber empleado un valor constante para la masa efectiva en la capa abierta, es lo que genera la altura tan grande de los "dientes de sierra" en la corrección de masa efectiva.

Un problema adicional que debe tomarse en cuenta al evaluar la corrección de masa efectiva, es que, debido a que $M^*/M_0 \approx 1$, cualquier cambio pequeño en el valor promedio, dado, del cociente M^*/M_0 puede generar un cambio brusco en el valor de la corrección de masa efectiva, lo cual dificulta los ajustes.

5.4) CONCLUSIONES.

El propósito de este trabajo ha sido implementar el cálculo de dos términos correctivos a una fórmula de masas nucleares, previamente desarrollada por otros autores. El propósito de esta línea de investigación, es entender la sistemática de las masas atómicas desde el punto de vista del modelo de capas del núcleo a un nivel fenomenológico consistente, tanto cualitativa como cuantitativamente.

Las correcciones, llamadas de masa efectiva y de llenamiento de capas, fueron definidas de acuerdo a la metodología seguida previamente, y descrita en la tesis. La evaluación numérica se realizó en base a los valores de los parámetros obtenidos en los ajustes previos, lo cual impuso una restricción significativa. De hecho, no se manejaron parámetros independientemente ajustables. Los resultados numéricos no coincidieron con lo que se esperaba empeorando, así, el ajuste global de la fórmula de masas.

Es importante señalar que el presente trabajo, al analizar los resultados negativos reveló la sensibilidad de correcciones pequeñas originadas en la capa en llenamiento, al mecanismo de saturación que implica la autoconsistencia del potencial común generado por la interacción entre pares. Este mecanismo de saturación consiste en que la contribución individual de un nucleón a la energía total está dada por ϵ_i y no por la energía de partícula individual ϵ_i . El signo de esta contribución, que es negativa para las capas interiores, depende

críticamente de los parámetros del potencial en el caso de la capa en llenamiento. El que eventualmente se haga positivo, muestra que el incrementar partículas disminuye la energía de amarre a partir de un cierto valor; asimismo, afecta críticamente la magnitud y signo de las correcciones calculadas.

Finalmente, las correcciones a una fórmula de masas con la estructura de la fórmula de Bethe - Weiszacker deben ser del orden del 1 %. En términos de la energía por nucleón, esto significa contribuciones menores que 100 keV en promedio; en el contexto del modelo que se está manejando, estas pueden surgir de modificaciones mínimas de los parámetros del potencial común. Existen diversas variaciones justificables tanto teórica como experimentalmente, como pueden ser: distintos radios para los potenciales de los protones y los neutrones ("piel neutrónica" en los núcleos pesados), radio y difusividad del potencial ligeramente menor para los núcleos mágicos que para los vecinos, etc. Una exploración de estas posibilidades con el propósito de lograr un ajuste físico, superaría conceptualmente a los diversos ajustes finos logrados en base a correcciones a la fórmula de B-W en que proliferan parámetros ad hoc ajustables independientemente. Tal investigación, sin embargo, trasciende el propósito de una tesis de licenciatura.

BIBLIOGRAFIA

- [Ba 76] Bauer, M. Atomic data and Nuclear Data Tables 17, 442-449, 1976.
- [BH 80] Bauer, M., and J.J.E. Herrera in AMCO 6, Eds. Nolen and Benenson, Plenum Publishing Co., P.365, 1980.
- [BHHC 82] Bauer, M., H. Hernández - Saldaña, P.E. Hodgson, and J. Quintanilla. J. Phys. G: Nucl. Phys. 8, p.525-539, 1982.
- [Be 70] Beiser, A. Conceptos de Física Moderna, primera edición revisada, Mc. Graw Hill. Mex. 1970.
- [CDL 77] Cohen - Tannoudji, C., B. Diu, and F. Laloe. Quantum Mechanics. John Wiley & Sons. Paris 1977.
- [Ev 55] Evans, Robley. The Atomic Nucleus. Mc Graw Hill Book Company, INC. 1955.
- [GR 65] Gradshteyn, I.S., and I.M. Ryschik. Tables of Integral Series and Products. Academic Press. New York 1965.
- [He 79] Herrera, J.J.E. La Sistemática de las Masas Nucleares y el Modelo de Capas. Tesis. U.N.A.M., 1979.
- [Ma 82] Mahaux, C. Proceedings of the Fifth Oaxtepec Symposium on Nuclear Physics, 147-207, 1982.
- [Ro 84] Rosales Macedo, H.A. La Energía de Deformación en la Sistemática de las Masas Nucleares. Tesis U.N.A.M., 1984.
- [RS 80] Ring, P., and P. Schuck. The Nuclear Many - Body Problem. Springer - Verlag. N.Y., Inc. 1980.
- [Se 64] E. Segrè. Nuclei and Particles. Benjamin, N.Y., 1964.
- [SF 74] de Shalit, A., and H. Feshbach. Theoretical Nuclear Physic Vol. 1, Nuclear Structure. Wiley, New York, 1974.