

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

FACULTAD DE CIENCIAS

PROBLEMA NUCLEAR DE DOS CUERPOS

T E S I S
Que para obtener el título de
F I S I C O
p r e s e n t a
JOSE LUIS DEL RIO CORREA

MEXICO, D. F.

1970



Universidad Nacional
Autónoma de México



UNAM – Dirección General de Bibliotecas
Tesis Digitales
Restricciones de uso

DERECHOS RESERVADOS ©
PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL

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

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

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

*A mis Padres María V. Correa de del Río y
José del Río Orozco*

que hicieron posibles mis estudios

Al Dr. Jorge Flores

A María Aurora

Agradecimientos

Deseo hacer patente mi agradecimiento al Dr. Jorge Flores Valdés por su valiosa ayuda y consejos en la elaboración de esta tesis.

Al Dr. Manuel de Llano por haber sugerido parte de esta tesis, así como por las valiosas discusiones acerca del análisis variacional con funciones de oscilador armónico.

Al Dr. V.C. Aguilera por sus valiosas sugerencias, así como por las discusiones acerca de la obtención de los elementos de matriz de la energía cinética en las bases correlacionadas.

Al Ing. T.A. Brody por la asesoría en los problemas de computación, así como por haberme facilitado un gran número de programas utilizados en este trabajo.

A los Sres. Manuel B. Tienza C. y Andrés V. Porta C., por haberme ayudado en la elaboración de las gráficas, así como en el análisis de datos.

Al Centro de Cálculo Electrónico de la U.N.A.M. por las facilidades para usar la B-5500 en los cálculos de este trabajo.

INDICE

	Pág.
INTRODUCCION	1
CAPITULO I	
1.1 Potenciales fenomenológicos.	3
CAPITULO II	
2.1 Deducción de las ecuaciones diferenciales acopladas para el deuterón.	13
2.2 Análisis variacional con funciones de oscilador armónico.	21
2.3 Cálculo de los elementos de matriz $\langle n(\alpha) \rho(\alpha) h n(\beta) \rho(\beta) \rangle$	25
2.4 Cálculo de μ , Q y $\sqrt{\langle r^2 \rangle}$	34
CAPITULO III	
3.1 Proceso de cálculo.	39
3.2 Análisis de los resultados.	42
3.3 Indice de figuras.	50
CAPITULO IV	
4.1 Funciones de onda correlacionadas.	61
4.2 Transformación de Löwdin.	66
4.3 Aplicación de correlaciones en el deuterón.	69
4.4 Cálculo de los elementos de matriz del operador identidad y de la energía cinética en las bases correlacionadas.	71
4.5 Elementos de matriz del hamiltoniano en la base correlacionada.	83
4.6 Momento cuadrupolar y valor esperado de r^2 .	87
CAPITULO V	
5.1 Proceso de cálculo.	93
5.2 Resultados.	94
5.3 Potenciales efectivos.	98
5.4 Conclusiones.	103

	Pág.
5.5 Indice de figuras.	106
CONCLUSIONES	119
REFERENCIAS	121

INTRODUCCION

En este trabajo se estudia el problema del deuterón, suponiendo que los nucleones interactúan por medio de potenciales "realistas" que contienen partes no centrales, pero cuyas funciones radiales son una superposición de gaussianas.

La función de onda variacional de prueba adoptada para este sistema se expresa como una combinación lineal de funciones de onda del oscilador armónico en coordenada relativa. Se estudia la forma en que la energía del estado base converge a la energía experimental, cuando se incrementa el número de funciones de la base del oscilador. Encontramos que la convergencia es sumamente lenta, lo cual se debe principalmente a que los potenciales usados contienen un carozo repulsivo muy alto.

En vista del resultado anterior nos propusimos la tarea de construir nuevas bases de funciones de onda, que sean fácilmente obtenibles de las funciones de oscilador y que tomen en cuenta la fuerte repulsión a cortas distancias del potencial nucleón-nucleón. Estas son las llamadas funciones de onda correlacionadas, que contienen los llamados parámetros de correlación que se determinan por medio de un análisis variacional. Encontramos los valores de estos parámetros para los potenciales propuestos

por Tamagaki y Eickenbroich.

También se comparan los resultados obtenidos para la energía con la base correlacionada con los que se obtienen usando la base de oscilador, encontrándose que en el potencial propuesto por Eickenbroich el uso de la base correlacionada nos da una mejoría apreciable.

Por último se estudia la posibilidad de obtener los resultados de la base correlacionada usando un potencial efectivo, llegando a la conclusión de que ésto no es posible para el tipo de potencial efectivo propuesto.

CAPITULO I

1.1 Potenciales Fenomenológicos.

Debido a que las fuerzas nucleares son inaccesibles a observaciones macroscópicas directas, nos vemos en la necesidad de hacer un gran número de suposiciones acerca de ellas. Así, se supone que estas fuerzas son derivables de un potencial, que este potencial es independiente de la carga, etc.

Bajo estas hipótesis se procede a la construcción de potenciales nucleares y, por comparación con los datos experimentales, se trata de encontrar una descripción de las fuerzas nucleares que actúan entre dos o más cuerpos como función de su separación relativa, orientación de spin, etc.

Para encontrar el potencial entre dos nucleones se procede a determinar su forma explícita por medio de tres procesos complementarios ⁴⁾ que son:

- a) La imposición de principios de invariancia.
- b) Datos Experimentales.
- c) Teoría del Campo.

Para el sistema de dos nucleones se cuenta con dos tipos diferentes de datos experimentales. Un conjunto de ellos consiste en los resultados del estudio del único sistema ligado: el deuterón. Experimentalmente se han encontrado diversas propiedades estáticas del deuterón ¹⁾ que pueden usarse para probar los diversos potenciales propuestos.

El otro tipo de datos experimentales del sistema de dos nucleones proviene del estudio de la dispersión de un nucleón por otro nucleón. La función de onda que describe a un ensemble de partículas moviéndose hacia el centro dispersor con velocidad constante, se ve alterada al salir de la región de interacción, debido a la perturbación producida por el centro dispersor. Tal cambio de la función de onda puede obtenerse haciendo un análisis en ondas parciales; el efecto del centro dispersor será el defasar cada una de las ondas parciales por el corrimiento de fase $\delta(2s+1 L_J)$, que depende del spin total S , el momento angular orbital L y el momento angular total J . Además la dispersión produce mezclas entre estados del mismo spin, paridad y momento angular total, las cuales son caracterizadas por los parámetros de mezcla ϵ_J . A partir de los datos experimentales de dispersión a bajas y altas energías, es posible conocer el conjunto de defasamientos que caracteriza la interacción nucleón-nucleón ²⁾. Desgraciadamente, el potencial que resulta del análisis de los datos de dispersión no es único.

En la Fig. 1.1 se muestran los defasamientos $\delta(2s+1 L_J)$ así como los parámetros de mezcla ϵ_J , obtenidos por Green, Mac Gregor

y Wilson³⁾. Veamos ahora cuales son las principales características que presentan los defasamientos⁴⁾:

a). - Los defasamientos $\delta(^1S_0)$ y $\delta(^3S_1)$ se vuelven negativos a partir de una cierta energía. Alrededor de 250 MeV en el estado singlete y 300 MeV en el estado triplete. Esto nos indica que para estos estados el potencial se vuelve repulsivo a distancias menores que una cierta distancia relativa, que es cercana a 0,4 fm.

b). - Las ondas con L impar para estados singlete, muestran defasamientos negativos para toda energía, lo cual indica una repulsión en los estados singlete non.

c). - Las ondas con L par superiores y para estados singlete, sufren un defasamiento positivo, indicando que existe una atracción en estados singlete par.

d). - Para los estados $^3P_{0,1,2}$ (triplete impar), se define un defasamiento promedio⁴⁾, dado por:

$$\delta_{3p} = \frac{1}{9} \left\{ \delta(^3P_0) + 3 \delta(^3P_1) + 5 \delta(^3P_2) \right\} \quad (1.1)$$

El cual al ser graficado, nos muestra que existe una repulsión para distancias menores que una cierta r_c y que a grandes distancias existe una débil repulsión.

De lo anterior se observa que para los estados 3^+ , 1^+ y 3^- existe una fuerte repulsión de corto alcance; por otra parte en el estado 1^- existe repulsión a toda distancia internucleónica, como se puede observar de los defasamientos, ya que estos son negativos para toda energía $(\delta(P_i))$.

Para explicar estos resultados experimentales en base a la teoría mesónica, propuesta por Yukawa, se ha seguido el llamado "Programa de Taketani". Taketani et al. dividen el problema en tres regiones:

a) La región externa, la cual consiste en distancias internucleónicas $r \geq 2.1 \text{ fm}$, en las cuales el potencial dominante es el debido al intercambio de un solo pión (OPEP). Como demostró Iwadare, este potencial tiene la forma:

$$V(\text{OPEP}) = \frac{f^2}{4\pi\kappa c} \frac{m_\pi c^2}{3} (\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) \times \left[(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) + \left(1 + \frac{3}{x} + \frac{3}{x^2} \right) \hat{S}_{12} \right] \frac{\exp(-x)}{x} \quad (1.2)$$

en donde $x = \frac{r m_\pi c}{\hbar}$

Se puede comprobar fácilmente ⁴⁾ que este potencial es atractivo para estados par (3^+ , 1^+) y repulsivos en estados non (3^- , 1^-).

b) La región intermedia para $1 \text{ fm} \leq r \leq 2.1 \text{ fm}$, en la cual el potencial debido al intercambio de dos piones (TPEP) es más importante

que el OPEP y llegan a ser considerables los efectos del retroceso nucleónico. En esta región todavía hay bastante ambigüedad respecto a la forma exacta del potencial.

c) La región fenomenológica en la cual existe una fuerte repulsión, que se supone es causada por el intercambio de mas de tres piones, así como el intercambio de bosones pesados. Debido a que existen pocos datos experimentales, esta región se ha representado suponiendo, ya sea que:

El potencial se hace infinito positivo para distancias menores que un radio dado r_c (Carozo Duro). O bien que:

El potencial se vuelve suavemente repulsivo a una cierta r hasta alcanzar un valor positivo en $r=0$, (Carozo Blando Repulsivo). Para explicar la existencia del carozo repulsivo hay tres hipótesis⁵⁾.

La primera de ellas considera que esta repulsión es independiente del estado y es producida por el intercambio de un mesón vectorial neutro. En la segunda hipótesis se considera que el carozo repulsivo es la manifestación de efectos dependientes de la velocidad, los cuales son fuertemente repulsivos para altas energías; y la tercera, es considerar el carozo como un substituto fenomenológico de la manifestación del carácter de muchos -cuerpos, del sistema que forma la parte central del nucleón.

En este trabajo trataremos con potenciales fenomenológicos de carozo blando, con correcciones no estáticas, para incluir los efectos de la dependencia de la velocidad. Estos potenciales tienen la siguiente forma:

$$V = V_C(r_{12}) + \hat{S}_{12} V_T(r_{12}) + (\vec{L} \cdot \vec{S}) V_{LS}(r_{12}) + \hat{W}_{12} V_W(r_{12}) + L^2 V_C(r_{12}) \quad (1.3)$$

en donde:

$$\vec{r}_{12} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2,$$

$$\vec{p}_{12} = (\vec{p}_1 - \vec{p}_2)/2,$$

$$\vec{L} = \vec{r}_{12} \times \vec{p}_{12} / \hbar,$$

$$S = (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) / 2,$$

$$\hat{S}_{12} = \frac{3(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r}_{12})(\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} - (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2),$$

$$\hat{W}_{12} = (\vec{L} \cdot \vec{S}) - \left\{ \delta_{LJ} + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) / 3 \right\} L(L+1),$$

Los últimos términos de (1.3) representan el sustituto fenomenológico para efectos no - estáticos. Además los potenciales que se usaron son tales que

$$V_\lambda(r_{12}) = \sum_{n=1}^3 \gamma_{\lambda n} \exp[-(r_{12}/\eta_{\lambda n})^2] \quad (1.4)$$

en donde el subíndice λ se refiere a las distintas partes, o sea, central, tensorial, etc. En (1.4) el mayor alcance ($n=1$) corresponde al OPEP. El más corto ($n=3$) caracteriza la interacción en la región interna - -

($r \leq 1 \text{ fm}$) y $n=2$ la interacción en la región intermedia.

La tabla I muestra los valores de los parámetros de los potenciales que hemos analizado, aunque solo se muestran para el estado triplete par.

De los potenciales usados, el potencial T1 (Tamagaki I) reproduce los cambios de fase hasta 300 MeV de energía⁵⁾, el T2 (Tamagaki 2) los ajusta sólo a bajas energías (menores de 100 MeV), y el potencial propuesto por H. Eickemeier y Hackenbroich, el cual describe correctamente la energía de amarre del deuterón y los datos de dispersión en los estados triplete hasta 300 MeV⁶⁾. Este último potencial fue usado en los cálculos con funciones correlacionadas, ya que recientemente⁷⁾ fue reportado el análisis variacional con funciones de oscilador.

Tabla I

Potenciales	η_{c1} γ_{c1}	η_{c2} γ_{c2}	η_{c3} γ_{c3}	η_{T1} γ_{T1}	η_{T2} γ_{T2}	η_{T3} γ_{T3}	η_{W2} γ_{W2}	η_{LL2} γ_{LL2}
T1	2.5	0.942	0.447	2.5	1.2	0.447	0.942	0.942
Tamagaki I	-5	-230	2000	-7.5	-67.5	67.5	-30	30
T2	2.5	0.942	0.6	2.5	1.2	0.6	0.942	0.942
Tamagaki II	-5	-210	500	-7.5	-67.5	67.5	-20	20
E	1.6223	1.4142	.4264					
Eickenbroich	-27.6	-70	600					

Las unidades de γ_i son MeV y las de η_i son fermis.

De los valores de los parámetros dados en la tabla I, se observa que el T1 y T2 difieren en la parte central, en la altura del carozo repulsivo, el cual es más blando en el potencial T2; además, el alcance de la gaussiana de la región más interna, es mayor en el T2.

El potencial E, que solo contiene parte central, tiene un carozo con una intensidad muy parecida al T2, pero con un alcance similar al T1. -- Respecto a la región intermedia T1 y T2 son practicamente iguales, pero el E es menos atractivo, aunque su gaussiana tiene un alcance mayor. Por último, en la región externa, los potenciales T1 y T2 son iguales mientras que el E tiene una intensidad mayor, pero con un alcance menor.

En su parte tensorial T1 y T2 sólo difieren en la región más interna, en el alcance de la gaussiana, el cual es mayor en el potencial T2.

Por último, las correcciones no estáticas W_{12} y L^2 están dadas por una sola gaussiana. La diferencia en esta parte entre T1 y T2 es la intensidad de las gaussianas.

Es necesario tener en cuenta que ${}^3V_T(r_{12})$ es bastante incierto, ya que los parámetros de dispersión ${}^3S_1 + {}^3D_1$, no han sido bien establecidos a altas energías.

De los potenciales fenomenológicos anteriores, solo el E describe correctamente la energía del estado base del deuterón, mientras que para los dos restantes (T1 y T2), el autor ⁵⁾ no menciona ningún resultado a este respecto.

En los capítulos posteriores, centraremos nuestro interés en encontrar la energía de amarre del deuterón, que predicen estos potenciales, - así como la convergencia al valor experimental.

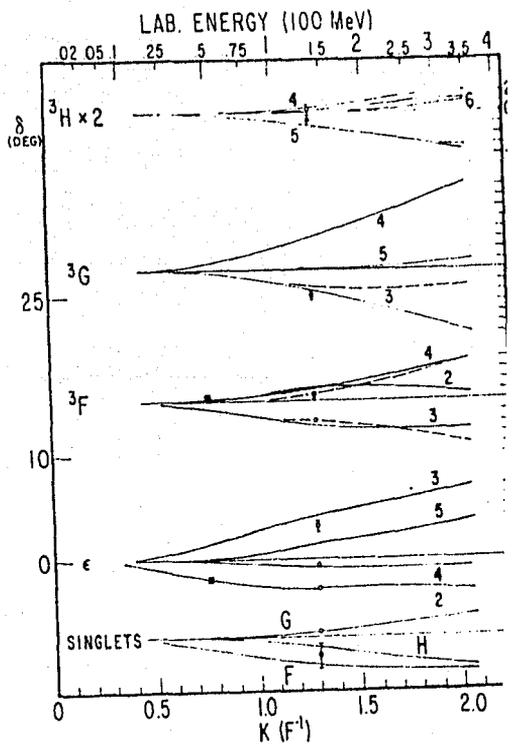
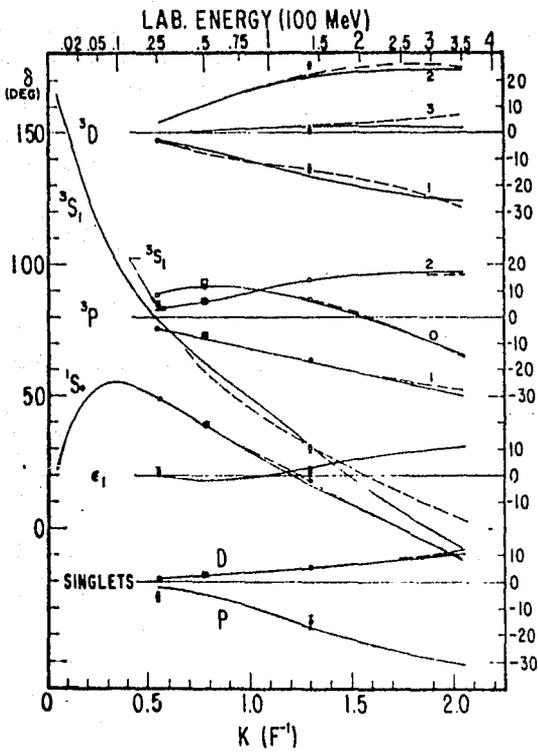


Fig. 1.1 Defasamientos $\delta(^{2S+1}L_J)$ y parámetros de mezcla ϵ_J .

Es por lo anterior que analizaremos el problema usando este sistema de referencia.

Sabemos que para poder reproducir el momento cuadrupolar eléctrico del deuterón, es necesario suponer que la función de onda del estado base es una mezcla de estados de triplete par con $l=0$ y $l=2$ ⁸⁾. Por lo tanto supondremos que la función de onda del deuterón estará dada por:

$$\psi = \varphi_S(r_{12}) \psi'_{011} + \varphi_D(r_{12}) \psi'_{211} \quad (2.1)$$

en donde se ha definido $\psi_{lsj}^{m_j}$ como

$$\psi_{lsj}^{m_j} = \sum_{m_l, m_s} \langle ls m_l m_s | j m_j \rangle Y_{lm_l}(\varrho) \chi_j^{m_s}(\sigma) \quad (2.2)$$

que por comodidad, será denotada por

$$|lsj\rangle = \psi_{lsj}^{m_j} \quad (2.3)$$

en el resto de este trabajo.

En la expresión (2.2), $Y_{lm_l}(\varrho)$ son los armónicos esféricos de orden l y proyección m_l , $\chi_j^{m_s}$ son las funciones de spin y $\langle ls m_l m_s | j m_j \rangle$ es un coeficiente de Clebsch-Gordan.

Procederemos a encontrar las ecuaciones diferenciales que cumplen las funciones radiales $\varphi_S(r_{12})$ y $\varphi_D(r_{12})$ de la expresión (2.1). Debido a que la función de onda (2.1) representa el estado base del deuterón, debe cumplir con la ecuación de Schrödinger.

$$H\psi = E\psi \quad (2.4)$$

en donde

$$H = T + V = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V \quad (2.5)$$

con $\mu = M/2$, siendo M la masa de un nucleón, y en donde E es la energía del estado base del deuterón.

Usando las expresiones (2.1), (2.4) y (2.5) tenemos:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V \right\} [\psi_S |011\rangle + \psi_D |211\rangle] = \\ = E [\psi_S |011\rangle + \psi_D |211\rangle] \end{aligned} \quad (2.6)$$

Multiplicando la ecuación anterior por el bra $\langle 011|$ tenemos:

$$\begin{aligned} \langle 011| \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V |011\rangle + \\ + \langle 011| \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V |211\rangle = \\ = E \left\{ \langle 011| \psi_S |011\rangle + \langle 011| \psi_D |211\rangle \right\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Recordando que

$$\hat{L}^2 |l s_j\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l s_j\rangle \quad (2.8)$$

Es por lo anterior que analizaremos el problema usando este sistema de referencia.

Sabemos que para poder reproducir el momento cuadrupolar eléctrico del deuterón, es necesario suponer que la función de onda del estado base es una mezcla de estados de triplete par con $\ell=0$ y $\ell=2$ ⁸⁾. Por lo tanto supondremos que la función de onda del deuterón estará dada por:

$$\psi = \varphi_S(r_{12}) \psi'_{011} + \varphi_D(r_{12}) \psi'_{211} \quad (2.1)$$

en donde se ha definido $\psi_{\ell s j}^{m_j}$ como

$$\psi_{\ell s j}^{m_j} = \sum_{m_\ell, m_s} \langle \ell s m_\ell m_s | j m_j \rangle Y_{\ell m_\ell}(\Omega) \chi_s^{m_s}(\sigma) \quad (2.2)$$

que por comodidad, será denotada por

$$|\ell s j\rangle = \psi_{\ell s j}^{m_j} \quad (2.3)$$

en el resto de este trabajo.

En la expresión (2.2), $Y_{\ell m_\ell}(\Omega)$ son los armónicos esféricos de orden ℓ y proyección m_ℓ , $\chi_s^{m_s}$ son las funciones de spin y $\langle \ell s m_\ell m_s | j m_j \rangle$ es un coeficiente de Clebsch-Gordan.

Procederemos a encontrar las ecuaciones diferenciales que cumplen las funciones radiales $\varphi_S(r_{12})$ y $\varphi_D(r_{12})$ de la expresión (2.1). Debido a que la función de onda (2.1) representa el estado base del deuterón, debe cumplir con la ecuación de Schrödinger.

$$H\psi = E\psi \quad (2.4)$$

en donde

$$H = T + V = \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V \quad (2.5)$$

con $\mu = M/2$, siendo M la masa de un nucleón, y en donde E es la energía del estado base del deuterón.

Usando las expresiones (2.1), (2.4) y (2.5) tenemos:

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V \right\} [\psi_S |011\rangle + \psi_D |211\rangle] = \\ = E [\psi_S |011\rangle + \psi_D |211\rangle] \end{aligned} \quad (2.6)$$

Multiplicando la ecuación anterior por el bra $\langle 011|$ tenemos:

$$\begin{aligned} \langle 011| \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V |011\rangle + \\ + \langle 011| \frac{\hbar^2}{2\mu} \left[-\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{\hat{L}^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V |211\rangle = \\ = E \left\{ \langle 011| \psi_S |011\rangle + \langle 011| \psi_D |211\rangle \right\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Recordando que

$$\hat{L}^2 |l s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |l s\rangle \quad (2.8)$$

$$\langle l' s' j' | l s j \rangle = \delta_{l'l} \delta_{s's} \delta_{j'j} \delta_{m_j' m_j} \quad (2.9)$$

tenemos

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \psi_S(r) + \langle 011 | V \psi_S(r) | 011 \rangle +$$

$$+ \langle 011 | V \psi_D(r) | 211 \rangle = E \psi_S(r)$$

Análogamente, multiplicando (2.6) por $\langle 211 |$ y usando (2.8) y (2.9) obtenemos:

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ -\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \psi_D(r) + \frac{6}{r^2} \psi_D(r) \right\} + \langle 211 | V \psi_D(r) | 211 \rangle +$$

$$+ \langle 211 | V \psi_S(r) | 011 \rangle = E \psi_D(r)$$

Por lo que las ecuaciones que cumplen $\psi_S(r)$ y $\psi_D(r)$ son:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \psi_S(r) + \langle 011 | V \psi_S(r) | 011 \rangle +$$

$$+ \langle 011 | V \psi_D(r) | 211 \rangle = E \psi_S(r) \quad (2.10)$$

$$\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ -\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r \psi_D(r) + \frac{6 \psi_D(r)}{r^2} \right\} + \langle 211 | V \psi_D(r) | 211 \rangle +$$

$$+ \langle 211 | V \psi_S(r) | 011 \rangle = E \psi_D(r) \quad (2.11)$$

Además, si suponemos que (2.1) está normalizada, tenemos

$$(\psi_S(r) | \psi_S(r)) + (\psi_D(r) | \psi_D(r)) = 1 \quad (2.12)$$

en donde hemos definido :

$$(\psi_\alpha(r) | \psi_\alpha(r)) = \int \psi_\alpha^*(r) \psi_\alpha(r) r^2 dr \quad (2.13)$$

que acostumbran llamar la probabilidad del estado S o la del estado D :

$$P_S = (\psi_S(r) | \psi_S(r)) \quad (2.14)$$

$$P_D = (\psi_D(r) | \psi_D(r)) \quad (2.15)$$

La condición de normalización entonces toma la forma :

$$P_S + P_D = 1 \quad (2.16)$$

Hasta aquí no hemos hecho ninguna suposición acerca de la forma del potencial $V(1,2)$. Consideremos un potencial de la forma :

$$V(1,2) = \sum_{\lambda} v_{\lambda}(r_{12}) \hat{Q}_{\lambda}(\Omega) \quad (2.17)$$

donde λ denota central, tensorial, spin-órbita, cuadrático y w_{12} y los operadores \hat{Q}_{λ} están definidos por ⁵⁾

$$\hat{Q}_c = 1 \quad (2.18)$$

$$\hat{Q}_T = \hat{S}_{12} = \frac{3(\sigma_1 \cdot \vec{r}_{12})(\sigma_2 \cdot \vec{r}_{12})}{r_{12}^2} - (\sigma_1 \cdot \sigma_2) \quad (2.19)$$

$$\hat{Q}_{LS} = \vec{L} \cdot \vec{S} \quad (2.20)$$

$$\hat{Q}_{W_{12}} = (\vec{L} \cdot \vec{S}) - \left(\delta_{lj} + \frac{\sigma_1 \cdot \sigma_2}{3} \right) l(l+1) \quad (2.21)$$

Teniendo en cuenta las ecuaciones (2.18) a (2.21) es fácil demostrar

$$\hat{S}_{12} \begin{pmatrix} |j-1, j\rangle \\ |j, j\rangle \\ |j+1, j\rangle \\ |j, 0\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{-2(j-1)}{2j+1} & 0 & \frac{6\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ \frac{6\sqrt{j(j+1)}}{2j+1} & 0 & \frac{-2(j+2)}{2j+1} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |j-1, j\rangle \\ |j, j\rangle \\ |j+1, j\rangle \\ |j, 0\rangle \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

$$\vec{L} \cdot \vec{S} |l, s, j\rangle = \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] \quad (2.23)$$

$$W_{12} |l, s, j\rangle = \begin{cases} 0 & l=j & s=0 \\ l(2l-1)/3 & l=j-1 & s=1 \\ -(2l-1)(2l+3)/3 & l=j & s=1 \\ (l+1)(2l+3)/3 & l=j+1 & s=1 \end{cases} \quad (2.24)$$

Veamos ahora que forma toman las ecuaciones (2.10) y (2.11) si suponemos que la interacción nucleón-nucleón es de la forma (2.17), para lo cual necesitamos evaluar las integrales angulares: $\langle 011 | V \varphi_S | 011 \rangle$,

$$\langle 211 | V \varphi_D | 211 \rangle, \langle 211 | V \varphi_S | 011 \rangle, \langle 011 | V \varphi_D | 211 \rangle.$$

En general tenemos que

$$\langle \ell' s' j' | V \varphi_\alpha | \ell s j \rangle = \sum_{\lambda} V_{\lambda}(r) \varphi_{\alpha}(r) \langle \ell' s' j' | \hat{Q}_{\lambda} | \ell s j \rangle \quad (2.25)$$

Haciendo uso de (2.25), así como de las ecuaciones (2.22) a (2.24) obtenemos

$$\langle 011 | V \varphi_S(r) | 011 \rangle = \varphi_S(r) V_C(r)$$

$$\begin{aligned} \langle 211 | V \varphi_D(r) | 211 \rangle = \varphi_D(r) [& V_C(r) - 2V_T(r) - 3V_{LS}(r) + \\ & + 7V_{W_{12}}(r) + 6V_2(r)] \end{aligned} \quad (2.26)$$

$$\langle 211 | V \varphi_S(r) | 011 \rangle = \varphi_S(r) [2\sqrt{2} V_T(r)]$$

$$\langle 011 | V \varphi_D(r) | 211 \rangle = \sqrt{8} \varphi_D(r) V_T(r)$$

Por lo que las ecuaciones acopladas para $\varphi_S(r)$ y $\varphi_D(r)$, suponiendo que la interacción nucleón-nucleón es del tipo (2.17), quedan expresadas como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + V_c(r) - E \right] \psi_S(r) = -\sqrt{8} V_T(r) \psi_D(r)$$

$$\left[\frac{\hbar^2}{2\mu} \left\{ -\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} r + \frac{6}{r^2} \right\} + V_c(r) - 2V_T(r) - 3V_{L_S}(r) + \right. \tag{2.27}$$

$$\left. + 7V_{W_{12}}(r) + 6V_Z(r) - E \right] \psi_D(r) = -\sqrt{8} \psi_S(r) V_T(r).$$

Así nuestro problema queda teóricamente resuelto, ya que lo único que necesitamos es conocer la forma explícita de las partes radiales del potencial $V_\lambda(r)$ y resolver el sistema de ecuaciones diferenciales (2.27). Una vez hecho esto conoceremos la función de onda que caracteriza al deuterón usando la ecuación (2.1). Desgraciadamente los métodos numéricos empleados para resolver este sistema de ecuaciones son bastante complicados, razón por la cual trataremos de encontrar $\psi_S(r)$ y $\psi_D(r)$ sin resolver el sistema de ecuaciones diferenciales acopladas.

2.2 Análisis variacional con funciones de oscilador armónico ²¹⁾

Para encontrar $\psi_S(r)$ y $\psi_D(r)$ haremos un análisis variacional usando como funciones de prueba combinaciones lineales de funciones de onda del oscilador armónico hasta un número dado de cuantos. Como hemos visto en la sección anterior la función de onda del estado base del deuterón tiene la forma

$$\psi = \psi_S(r) \psi_{011}' + \psi_D(r) \psi_{211}'$$

Las funciones radiales $\psi_S(r)$ y $\psi_D(r)$ se expresan como combinaciones lineales de funciones de oscilador, o sea

$$\psi_S(r) = \sum_{n=0}^{N/2} S_n R_{n0} \quad (2.28)$$

$$\psi_D(r) = \sum_{n=0}^{N/2-1} D_n R_{n2}$$

donde definimos el número de cuantos como

$$N = 2n + l \quad (2.29)$$

Entonces la función de onda de prueba que usaremos para una aproximación a un número de cuantos dado toma la forma:

$$\psi = \sum_{n=0}^{N/2} S_n R_{n0} Y'_{011} + \sum_{n=0}^{N/2-1} D_n R_{n2} Y'_{211}$$

La cual puede expresarse en una forma más compacta como:

$$\psi = \sum_{q=0}^N C_q R_{n(q)} \ell(q) Y'_{\ell(q)11} \quad (2.30)$$

en donde se han definido $n(q)$ y $\ell(q)$ como:

$$n(q) = q \text{ módulo } (N/2 + 1) = \begin{cases} q & q \leq N/2 \\ q - (N/2 + 1) & q > N/2 \end{cases} \quad (2.31)$$

$$\ell(q) = \begin{cases} 0 & q \leq N/2 \\ 2 & q > N/2 \end{cases}$$

Por comodidad definimos el ket

$$|n(q) \ell(q) \rangle \equiv R_{n(q) \ell(q)} | \ell(q) \rangle \quad (2.32)$$

y usando la definición anterior nuestra función de onda de prueba toma la forma:

$$\psi = \sum_{q=0}^N c_q |n(q) \ell(q) \rangle \quad (2.33)$$

Como deseamos que nuestra función de onda de prueba esté normalizada, los coeficientes c_q cumplen con

$$\sum |c_q|^2 = 1 \quad (2.34)$$

En esta notación la probabilidad del estado S y D toman la forma:

$$P_S = \sum_{q=0}^{N/2} |c_q|^2 \quad (2.35)$$

$$P_D = \sum_{q=N/2+1}^N |c_q|^2$$

Nuestro problema consiste en encontrar la mejor de las funciones de prueba del tipo (2.33), para lo cual pediremos que el conjunto de c_q que determinan la función de prueba cumplan con la condición de normalización dada en (2.34) y que sean tales que minimicen la energía del sistema que estamos considerando. El valor esperado del hamiltoniano es

$$E = \langle H \rangle = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \quad (2.36)$$

y usando nuestra función de onda de prueba tenemos :

$$\langle H \rangle = \frac{\sum_{qr} c_q^* c_r \langle n(q) l(q) || H | n(r) l(r) \rangle}{\sum_{ps} c_p^* c_s \langle n(p) l(p) || n(s) l(s) \rangle} \quad (2.37)$$

Como se desea encontrar el conjunto de c_q tales que minimicen el valor esperado del hamiltoniano, estas c_q serán tales que ante una pequeña variación de los parámetros c_q^* , el valor esperado del hamiltoniano será estable. En símbolos, necesitamos que :

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial c_q^*} = 0 \quad (2.38)$$

Usando la expresión (2.37) para el valor esperado del hamiltoniano tenemos :

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial c_q^*} = \frac{\sum_r c_r \{ \langle n(q) l(q) || H | n(r) l(r) \rangle - E \delta_{n(q)l(q), n(r)l(r)} \}}{\sum_{ps} c_p^* c_s \langle n(p) l(p) || n(s) l(s) \rangle} \quad (2.39)$$

Al imponer la condición extremal (2.38) vemos que los parámetros c_r que minimizan la energía del sistema tienen que cumplir con la siguiente condición :

$$\sum_{r=0}^N c_r \{ \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | H | n(r) \ell(r) \rangle - E \delta_{n(\alpha)n(r)} \delta_{\ell(\alpha)\ell(r)} \} = 0 \quad (2.40)$$

Para que este sistema de $N+1$ ecuaciones homogéneas tenga solución distinta de la trivial es necesario que:

$$\det | \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | H | n(r) \ell(r) \rangle - E \delta_{n(\alpha)n(r)} \delta_{\ell(\alpha)\ell(r)} | = 0 \quad (2.41)$$

Lo cual es conocido como el determinante secular.

Para resolver (2.41) procederemos a construir la matriz H cuyos elementos son

$$H_{\alpha\beta} = \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | H | n(\beta) \ell(\beta) \rangle \quad (2.42)$$

la cual será diagonalizada posteriormente. El mínimo de sus eigenvalores, es entonces la energía del estado base y consecuentemente el eigenvector correspondiente es el conjunto de c_g .

2.3 Cálculo de los elementos de matriz $\langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | H | n(\beta) \ell(\beta) \rangle$.

En esta sección deduciremos las expresiones para los elementos de matriz del hamiltoniano de dos partículas que interactúan por medio de un potencial que, en su dependencia radial, es una superposición de G gaussianas; usaremos como base las funciones de onda del oscilador armónico. El hamiltoniano para dos partículas que interactúan por medio de

un potencial $V(r')$ es:

$$H = \frac{p'^2}{2\mu} + V(r') \quad (2.43)$$

en donde $\vec{r}' = \vec{r}_2 - \vec{r}_1 = \vec{r}_{12}$ y μ es la masa reducida del sistema. En vista de que un gran número de resultados con funciones de oscilador se encuentran en términos de variables adimensionales definidas¹⁰⁾ como:

$$\begin{aligned} \vec{r} &= \sqrt{\mu\omega/\hbar} \vec{r}' \\ \vec{p} &= \vec{p}' / \sqrt{\mu\hbar\omega} \end{aligned} \quad (2.44)$$

estas serán usadas en el presente trabajo.

El hamiltoniano en función de las variables adimensionales toma la forma:

$$H = \frac{1}{2} \hbar\omega p'^2 + V(\sqrt{\hbar/\mu\omega} \vec{r}') \quad (2.45)$$

Como hemos mencionado anteriormente, los potenciales que usaremos son del tipo

$$V(r') = \sum_{\lambda} V_{\lambda}(r') \hat{\phi}_{\lambda} \quad (2.46)$$

La forma explícita de las funciones radiales $V_{\lambda}(r')$ fue escogida tal que la evaluación de los elementos de matriz del potencial fueran calculables de una manera sencilla, razón por la cual los potenciales con que trabajaremos son los propuestos por Tamagaki y H. Eickemeier et al, los cuales son po-

tenciales fenomenológicos y su parte radial es una superposición de gaussianas, o sea

$$V_{\lambda}(r) = \sum V_{q\lambda} \exp[-(r'/\eta_{q\lambda})^2] \quad (2.47)$$

En función de las variables adimensionales definidas por las ecuaciones (2.44) de esta sección tenemos:

$$V_{\lambda}(r) = \sum_{q=1}^G V_{q\lambda} \exp(-2\alpha_{q\lambda} r^2/\epsilon) \quad (2.48)$$

en donde hemos definido $\alpha_{q\lambda}$ y ϵ como:

$$\alpha_{q\lambda} = \frac{\hbar^2}{M m c^2} \frac{1}{\eta_{q\lambda}^2} \quad (2.49)$$

$$\epsilon = \frac{\hbar \omega}{m c^2}$$

con M la masa del nucleón y m la del electrón.

Por comodidad definimos el hamiltoniano adimensional

$$h = \frac{H}{m c^2} \quad (2.50)$$

$$v_{\lambda}(r) = \frac{V_{\lambda}(r)}{m c^2} \quad (2.51)$$

cuyos elementos de matriz toman la forma

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \hbar | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle &= \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \frac{\epsilon}{2} p^2 | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle + \\ &+ \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | V(r) | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle \end{aligned} \quad (2.52)$$

Para calcular el elemento de matriz de la energía cinética usaremos el hecho de que

$$\frac{1}{2} \epsilon p^2 = \frac{H_{osc}}{m c^2} - \frac{1}{2} \epsilon r^2 \quad (2.53)$$

en donde H_{osc} es el hamiltoniano para una partícula sometida a un potencial de oscilador armónico. Usando el hecho siguiente

$$H_{osc} | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle = (2n(\beta) + \ell(\beta) + 3/2) \hbar \omega | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle \quad (2.54)$$

que puede demostrarse fácilmente, teniendo en cuenta

$$\begin{aligned} H_{osc} R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\alpha) &= (2n + \ell + 3/2) \hbar \omega R_{n\ell}(r) Y_{\ell m_\ell}(\alpha) \\ | n(\beta) \ell(\beta) s_j \rangle &= R_{n(\beta) \ell(\beta)} \sum_{m_\ell(\beta), m_s} \langle \ell(\beta) s \ m_\ell(\beta) \ m_s | j \ m_j \rangle Y_{\ell(\beta) m_\ell(\beta)}(\alpha) \chi_s^{m_s}(\sigma) \end{aligned} \quad (2.55)$$

y usando las expresiones (2.53) y (2.54), tenemos que el elemento de matriz de la energía cinética (adimensional) toma la forma:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \frac{\epsilon}{2} p^2 | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle &= (2n(\beta) + \ell(\beta) + 3/2) \epsilon \delta_{n(\alpha) n(\beta)} \delta_{\ell(\alpha) \ell(\beta)} \\ &- \frac{1}{2} \epsilon \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | r^2 | n(\beta) \ell(\beta) | \rangle. \end{aligned}$$

Si ahora definimos el ket

$$|n(\beta) \ell(\beta)\rangle = R_{n(\beta) \ell(\beta)} \quad (2.56)$$

y recordamos la definición del ket $|n(\beta) \ell(\beta)\rangle$, el elemento de matriz de la energía cinética queda expresado como

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \frac{\epsilon}{2} p^2 | n(\beta) \ell(\beta) \rangle \rangle &= (2n(\beta) + \ell(\beta) + 3/2) \epsilon \delta_{n(\alpha) n(\beta)} \delta_{\ell(\alpha) \ell(\beta)} - \\ &- \frac{\epsilon}{2} (n(\alpha) \ell(\alpha) | r^2 | n(\beta) \ell(\beta) \rangle) \delta_{\ell(\alpha) \ell(\beta)} \end{aligned} \quad (2.57)$$

Teniendo en cuenta que ¹¹⁾

$$\begin{aligned} (n(\alpha) \ell(\alpha) | r^2 | n(\beta) \ell(\beta) \rangle) &= -\sqrt{n(\alpha)(n(\alpha) + \ell(\alpha) + 1/2)} \delta_{n(\beta), n(\alpha)-1} + \\ &+ (2n(\alpha) + \ell(\alpha) + 3/2) \delta_{n(\beta), n(\alpha)} - \sqrt{(n(\alpha)+1)(n(\alpha) + \ell(\alpha) + 3/2)} \delta_{n(\beta), n(\alpha)+1} \end{aligned} \quad (2.58)$$

de las ecuaciones (2.57) y (2.58) obtenemos la expresión final para el elemento de matriz de la energía cinética:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \frac{\epsilon}{2} p^2 | n(\beta) \ell(\beta) \rangle \rangle &= \frac{1}{2} \epsilon \left[(2n(\beta) + \ell(\beta) + 3/2) \delta_{n(\beta), n(\alpha)} + \right. \\ &+ \sqrt{(n(\beta)+1)(n(\beta) + \ell(\beta) + 3/2)} \delta_{n(\beta)+1, n(\alpha)} \\ &+ \left. \sqrt{n(\beta)(n(\beta) + \ell(\beta) + 1/2)} \delta_{n(\beta)-1, n(\alpha)} \right] \delta_{\ell(\alpha), \ell(\beta)} \end{aligned} \quad (2.59)$$

De la definición del ket

$$|l s j\rangle = \sum_{l' s' j'} y_{l' s' j'}^{m_j} \quad (2.60)$$

el elemento de matriz de la energía potencial (adimensional) es:

$$\langle n(\alpha) l(\alpha) 11 | \psi(r) | n(\beta) l(\beta) 11 \rangle = \sum_{\lambda} \langle n(\alpha) l(\alpha) | \psi_{\lambda}(r) | n(\beta) l(\beta) \rangle \langle l(\alpha) 11 | \hat{\phi}_{\lambda} | l(\beta) 11 \rangle \quad (2.61)$$

Para obtener los elementos de matriz de los operadores angulares usamos las expresiones (2.18) a (2.24) ya que las primeras nos dan las definiciones de los operadores angulares y las últimas nos permiten evaluar sus valores esperados. Desarrollando la expresión anterior tenemos:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) l(\alpha) 11 | \psi(r) | n(\beta) l(\beta) 11 \rangle &= \left[\langle n(\alpha) l(\alpha) | \psi_c | n(\beta) l(\beta) \rangle - \right. \\ &- \frac{l(\beta)(l(\beta)+1)}{2} \langle n(\alpha) l(\alpha) | \psi_{L^2} | n(\beta) l(\beta) \rangle + W_{l(\beta),1} \langle n(\alpha) l(\alpha) | \psi_{W_{12}} | n(\beta) l(\beta) \rangle + \\ &+ l(\beta)(l(\beta)+1) \langle n(\alpha) l(\alpha) | \psi_{L^2} | n(\beta) l(\beta) \rangle \left. \right] \delta_{l(\alpha), l(\beta)} + \langle n(\alpha) l(\alpha) | \psi_T | n(\beta) l(\beta) \rangle \times \\ &\times \left[S_{l(\beta), l(\alpha), 1} \delta_{l(\beta), l(\alpha)} + S_{l(\alpha), l(\beta) \pm 2, 1} \delta_{l(\alpha), l(\beta) \pm 2} \right] \quad (2.62) \end{aligned}$$

en donde los índices c , L^2 , W_{12} , T y L^2 se refieren a central, spin-órbita, corrección no estática, tensorial y cuadrática, respectivamente.

Para evaluar los términos $W_{l(\beta),1}$, $S_{l(\beta), l(\alpha), 1}$ y $S_{l(\alpha), l(\beta) \pm 2, 1}$ necesitamos conocer los valores explícitos de $l(\alpha)$ y $l(\beta)$; haciendo uso de las ecuaciones (2.22) a (2.24) podemos

evaluar fácilmente estos coeficientes.

Con las ecuaciones (2.59) y (2.62) estamos en posición de calcular los elementos de matriz del hamiltoniano, en los cuales distinguiremos dos casos, el primero cuando $l(\alpha) = l(\beta) = 0$ o 2 y segundo cuando $l(\alpha) = 2$ y $l(\beta) = 0$.

Primer caso, $l(\alpha) = l(\beta)$:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) l(\alpha) | | h | n(\beta) l(\beta) | \rangle &= \frac{1}{2} \in \left[(2n(\beta) + l(\beta) + 3/2) \delta_{n(\beta), n(\alpha)} + \right. \\ &+ \left. \sqrt{(n(\beta)+1)(n(\beta)+l(\beta)+3/2)} \delta_{n(\beta)+1, n(\alpha)} + \sqrt{n(\beta)(n(\beta)+l(\beta)+1/2)} \delta_{n(\beta)-1, n(\alpha)} \right] \\ &+ (n(\alpha) l(\alpha) | \psi_6 | n(\beta) l(\alpha) \rangle - \frac{1}{2} (n(\alpha) l(\alpha) | \psi_5 | n(\beta) l(\beta) \rangle + \\ &+ \left. \left\{ \begin{matrix} 0 \\ 7 \end{matrix} \right\} (n(\alpha) l(\alpha) | \psi_{w_{12}} | n(\beta) l(\alpha) \rangle + l(\alpha)(l(\alpha)+1) (n(\alpha) l(\alpha) | \psi_2 | n(\beta) l(\alpha) \rangle + \right. \\ &+ \left. \left. \left\{ \begin{matrix} 0 \\ -2 \end{matrix} \right\} (n(\alpha) l(\alpha) | \psi_7 | n(\beta) l(\alpha) \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.63)$$

En el miembro derecho de la expresión anterior, en el sexto y en el último términos se toma el valor cero si $l(\alpha) = l(\beta) = 0$ y los valores 7 y -2, respectivamente, si $l(\alpha) = l(\beta) = 2$.

Segundo caso, $l(\alpha) = l(\beta) \pm 2$

$$\langle n(\alpha) l(\alpha) | | h | n(\beta) l(\beta) | \rangle = \sqrt{8} (n(\alpha) l(\alpha) | \psi_7 | n(\beta) l(\beta) \rangle \quad (2.64)$$

Las expresiones (2.63) y (2.64) nos permiten calcular los elementos de ma

triz del hamiltoniano en función de los elementos de matriz de las partes radiales del potencial con respecto a las funciones radiales de oscilador armónico.

Deduciremos ahora la expresión explícita de los elementos de matriz $(n(\alpha)l(\alpha) | \mathcal{V}_\lambda | n(\beta)l(\beta))$ usando para \mathcal{V}_λ la expresión dada en (2.48)

$$\begin{aligned} (n(\alpha)l(\alpha) | \mathcal{V}_\lambda | n(\beta)l(\beta)) &= \\ &= \sum_{q=1}^G A_{q\lambda} (n(\alpha)l(\alpha) | \exp(-2dq_\lambda r^2/\epsilon) | n(\beta)l(\beta)) \end{aligned} \quad (2.65)$$

en donde se ha definido

$$A_{q\lambda} = \frac{V_{q\lambda}}{mc^2}$$

Desarrollando el elemento de matriz de la derecha en una serie de integrales de Talmi^{12, 13)} tenemos:

$$\begin{aligned} (n(\alpha)l(\alpha) | \exp(-2dq_\lambda r^2/\epsilon) | n(\beta)l(\beta)) &= \\ \frac{1}{2}(l(\alpha)+l(\beta))+n(\alpha)+n(\beta) & \\ = \sum_{p=\frac{1}{2}(l(\alpha)+l(\beta))} B(n(\alpha), l(\alpha), n(\beta), l(\beta), p) I_p^\lambda & \end{aligned} \quad (2.66)$$

La integral de Talmi de orden p , I_p^λ está definida por:

$$I_p^\lambda = \frac{2}{\Gamma(p+3/2)} \int_0^\infty r^{2p} \exp(-r^2) \exp(-2dq_\lambda r^2/\epsilon) r^2 dr \quad (2.67)$$

que es fácilmente evaluable, ya que

$$\int_0^{\infty} r^{2n} \exp(-ar^2) dr = \frac{\Gamma(n+1/2)}{2} \cdot \frac{1}{a^{n+1/2}} \quad (2.68)$$

Haciendo uso de las ecuaciones (2.65) a (2.68) tenemos que la expresión explícita de los elementos de matriz de la parte radial del potencial está dada por:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | \psi_{\lambda} | n(\beta) \ell(\beta) \rangle = \\ = \sum_{q=1}^q A_{q\lambda} \left[\begin{matrix} \frac{1}{2}(\ell(\alpha) + \ell(\beta)) + n(\alpha) + n(\beta) \\ \ell(\alpha), \ell(\beta), p \\ \frac{1}{2}(\ell(\alpha) + \ell(\beta)) \end{matrix} \right] \frac{1}{\left(1 + \frac{2dq\lambda}{\epsilon}\right)^{p+3/2}} \end{aligned} \quad (2.69)$$

Las expresiones (2.63), (2.64) y (2.69) nos permiten pues calcular los elementos de matriz del hamiltoniano para dos partículas que interactúan por medio de un potencial que tiene una parte radial, que consiste en una superposición de gaussianas.

Usando las ecuaciones (2.63) y (2.64) se construyó la matriz. Mostraremos explícitamente los distintos elementos de matriz necesarios para construirla.

Para $\ell(\alpha) = \ell(\beta) = 0$, $n(\alpha) = n'$, $n(\beta) = n$

$$\begin{aligned} \langle n' 0_{11} | h | n 0_{11} \rangle = \frac{\epsilon}{2} \left[(2n+3/2) \delta_{nn'} + \sqrt{(n+1)(n+3/2)} \delta_{n+1, n'} + \right. \\ \left. + \sqrt{n(n+1/2)} \delta_{n-1, n'} + \langle n' 0 | \psi_0 | n 0 \rangle \right] \end{aligned} \quad (2.70)$$

Para $l(\alpha) = l(\beta) = 2$, $n(\alpha) = n'$, $n(\beta) = n$

$$\begin{aligned} \langle n'211|h|n211\rangle &= \frac{e}{2} \left[(2n+7/2) \delta_{nn'} + \sqrt{(n+1)(n+7/2)} \delta_{n+1,n'} \right. \\ &+ \left. \sqrt{n(n+5/2)} \delta_{n-1,n'} \right] + (n'2|\psi_c|n2) - 3(n'2|\psi_{LS}|n2) + \\ &+ 7(n'2|\psi_{W12}|n2) + 6(n'2|\psi_2|n2) - 2(n'2|\psi_T|n2) \end{aligned} \quad (2.71)$$

Para $l(\alpha) = 0$, $l(\beta) = 2$, $n(\alpha) = n'$, $n(\beta) = n$

$$\langle n'011|h|n211\rangle = \langle n211|h|n'011\rangle = \sqrt{8} (n'0|\psi_T|n2) \quad (2.72)$$

2.4 Cálculo de μ , Q y $\sqrt{\langle r'^2 \rangle}$

En esta sección deduciremos las expresiones para el momento cuadrupolar eléctrico así como el radio cuadrado medio.

Sabemos que el momento cuadrupolar se puede expresar como:

$$Q = \frac{e}{4} \int \psi^* (z'^2 - r'^2) \psi d\gamma \quad (2.73)$$

en donde \vec{r}' es el vector de posición relativo entre las dos partículas, pasando a las coordenadas adimensionales y usando la definición de los armónicos esféricos tenemos:

$$Q = e \sqrt{\frac{\pi}{5}} \frac{\hbar}{\mu\omega} \int \psi^* r^2 Y_2^0 \psi d\gamma = e \sqrt{\frac{\pi}{5}} \frac{\hbar}{\mu\omega} \langle r^2 Y_2^0 \rangle \quad (2.74)$$

Recordando que la función de onda del deuterón es

$$\psi = \varphi_S(r) Y_{011}^1 + \varphi_D(r) Y_{211}^1 \quad (2.75)$$

se tiene que, el valor esperado de $r^2 Y_2^0$ toma la forma:

$$\begin{aligned} \langle r^2 Y_2^0 \rangle &= (\varphi_S | r^2 | \varphi_S) \langle 011 | Y_2^0 | 011 \rangle + 2(\varphi_S | r^2 | \varphi_D) \langle 011 | Y_2^0 | 211 \rangle + \\ &+ (\varphi_D | r^2 | \varphi_D) \langle 211 | Y_2^0 | 211 \rangle \end{aligned} \quad (2.76)$$

Para calcular las integrales angulares haremos uso del teorema de Gaunt, el cual establece que

$$\begin{aligned} \int Y_\ell^m Y_{\ell'}^{m'} Y_{\ell''}^{m''} d\Omega &= \\ &= \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)}{4\pi(2\ell+1)}} \langle \ell \ell' m m' | \ell m \rangle \langle \ell \ell' 0 0 | \ell 0 \rangle \end{aligned} \quad (2.77)$$

con lo cual obtenemos

$$\langle r^2 Y_2^0 \rangle = \frac{1}{10} \sqrt{\frac{\pi}{5}} \left\{ \sqrt{2} (\varphi_S | r^2 | \varphi_D) - \frac{1}{2} (\varphi_D | r^2 | \varphi_D) \right\} \quad (2.78)$$

Usando esta expresión, el momento cuadrupolar eléctrico puede expresarse como

$$Q = e \frac{\hbar}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{10} \left\{ \sqrt{2} (\varphi_S | r^2 | \varphi_D) - \frac{1}{2} (\varphi_D | r^2 | \varphi_D) \right\} \quad (2.79)$$

Debido a que φ_S y φ_D se expresan como una combinación lineal de funciones radiales de oscilador armónico con momento angular cero y dos respectivamente, o sea

$$\begin{aligned}\psi_S &= \sum_{n=0}^{N/2} S_n R_{n0} \\ \psi_D &= \sum_{n=0}^{N/2-1} D_n R_{n2}\end{aligned}\tag{2.80}$$

Los elementos de matriz que necesitamos evaluar toman la forma :

$$\begin{aligned}(\psi_S | r^2 | \psi_D) &= \sum_{n=0}^{N/2} \sum_{n'=0}^{N/2-1} S_n D_{n'} (n0 | r^2 | n'2) \\ (\psi_D | r^2 | \psi_D) &= \sum_{n=0}^{N/2-1} \sum_{n'=0}^{N/2-1} D_n D_{n'} (n2 | r^2 | n'2)\end{aligned}\tag{2.81}$$

Para evaluar los elementos de matriz de r^2 con respecto a las funciones radiales de oscilador armónico usamos los resultados deducidos en la referencia (11). Haciendo uso de estos resultados se obtiene

$$\begin{aligned}(\psi_S | r^2 | \psi_D) &= \sum_{n=0}^{N/2-1} D_n \left\{ S_n \sqrt{(n+5/2)(n+3/2)} - 2S_{n+1} \sqrt{(n+1)(n+5/2)} \right\} + \\ &+ \sum_{n=1}^{N/2-1} S_{n+1} D_{n-1} \sqrt{n(n+1)} \\ (\psi_D | r^2 | \psi_D) &= \sum_{n=0}^{N/2-1} D_n^2 (2n+7/2) - 2 \sum_{n=1}^{N/2-1} D_n D_{n-1} \sqrt{n(n+5/2)}\end{aligned}\tag{2.82}$$

Por lo que el momento cuadrupolar eléctrico toma la forma :

$$\begin{aligned}Q &= e \frac{k}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{20} \left\{ \sum_{n=0}^{N/2-1} D_n \left[\sqrt{2n+5} (S_n \sqrt{2(2n+3)} - \right. \right. \\ &- 4 S_{n+1} \sqrt{n+1}) - D_n (2n+7/2) \left. \right] + 2 \sum_{n=1}^{N/2-1} D_{n-1} \left[S_{n+1} \sqrt{2n(n+1)} \right. \\ &\left. \left. + D_n \sqrt{n(n+5/2)} \right] \right\}\end{aligned}\tag{2.83}$$

Esta expresión nos permite evaluar el momento cuadrupolar eléctrico en función del número de cuantos, la frecuencia del oscilador, la cual es - nuestro parámetro variacional y los coeficientes S_n y D_n . La frecuencia del oscilador se escogerá como aquella que nos de un mínimo en la energía para un número dado de cuantos, siendo el eigenvector correspondiente a esta energía el conjunto de coeficientes S_n y D_n .

Calcularemos ahora el valor esperado de r^2 con respecto a nuestra función de onda de prueba. Sabemos que

$$\langle r^2 \rangle = \int \psi^* r^2 \psi d\tau \quad (2.84)$$

y usando la expresión (2.75) para la función de onda, obtenemos:

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\hbar}{\mu\omega} \left[\langle \psi_S | r^2 | \psi_S \rangle + \langle \psi_D | r^2 | \psi_D \rangle \right] \quad (2.85)$$

Nos basta ahora calcular la primera integral radial, ya que la segunda fue calculada anteriormente. Usando el desarrollo de ψ_S en términos de las funciones radiales del oscilador tenemos:

$$\langle \psi_S | r^2 | \psi_S \rangle = \sum_{n=0}^{N/2} \sum_{n'=0}^{N/2} S_n S_{n'} \langle n_0 | r^2 | n'_0 \rangle \quad (2.86)$$

evaluando estos últimos elementos de matriz¹¹⁾ se tiene

$$\langle \psi_S | r^2 | \psi_S \rangle = \sum_{n=0}^{N/2} S_n^2 (2n+3/2) - 2 \sum_{n=1}^{N/2} S_n S_{n-1} \sqrt{n(n+1/2)} \quad (2.87)$$

Usando este último resultado:

$$\langle r^{12} \rangle = \frac{2\hbar}{\mu\omega} \left[\frac{3}{4} + D_0^2 + \sum_{n=1}^{N/2} S_n (nS_n - \sqrt{n(n+1/2)} S_{n-1}) + \sum_{n=1}^{N/2-1} D_n ((n+1)D_n - \sqrt{n(n+5/2)} D_{n-1}) \right] \quad (2.88)$$

Con lo cual estamos en disposición de calcular el valor esperado de r^{12} como una función del número de cuantos, la frecuencia del oscilador y las componentes del eigenvector.

Respecto al momento magnético del deuterón, sabemos que tiene la siguiente expresión ³⁾:

$$\mu = (\mu_p + \mu_n) - \frac{3}{2} (\mu_p + \mu_n - 1/2) \mu_D \quad (2.89)$$

Hasta aquí hemos mostrado el formalismo necesario para atacar el problema de dos cuerpos, cuando se usa la base del oscilador, en el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos para el cálculo de la energía del estado base del deuterón, usando los potenciales T1 y T2.

CAPITULO III

3.1 Proceso de Cálculo.

En el análisis variacional con funciones de onda del oscilador armónico, se calcularon los elementos de matriz del hamiltoniano, usando las expresiones deducidas en el capítulo anterior.

Debido a que en los potenciales fenomenológicos propuestos por Tamagaki, el potencial en el estado triplete par no tiene parte spin-órbita y los parámetros propuestos para la parte cuadrática y la parte de corrección no estática sólo difieren en el signo de la profundidad, los elementos de matriz para la parte \mathcal{L}^2 , w_{12} y \mathcal{L}^2 para los potenciales T1 y T2 son:

$$(n'2|\psi_{\mathcal{L}^2}|n2) = 0 \quad (3.1)$$

$$(n'2|\psi_{w_{12}}|n2) = -(n'2|\psi_{\mathcal{L}^2}|n2) \quad (3.2)$$

Por consiguiente para los potenciales T1 y T2, los elementos de matriz del hamiltoniano para $\ell=2$ son de la forma siguiente:

$$\begin{aligned} \langle n'211|h|n211\rangle = & \frac{\epsilon}{2} \left[(2n+7/2) \delta_{nn'} + \sqrt{(n+1)(n+7/2)} \delta_{n+1,n'} \right. \\ & \left. + \sqrt{n(n+5/2)} \delta_{n-1,n'} \right] + \langle n'21|\psi_c|n2\rangle - \langle n'2|\psi_c|n2\rangle \\ & - 2\langle n'2|\psi_T|n2\rangle \end{aligned} \quad (3.3)$$

Para el potencial de Eickenbroich et al (E), consideramos que la función de onda del deuterón sólo contiene onda S . Esto se hizo para comparar los resultados usando la base correlacionada con los obtenidos por W.W. Yeh⁷⁾, así como para comprobar el programa usado.

Usando las expresiones deducidas en el capítulo anterior, calculamos las integrales radiales $\langle n'l'|\psi_\lambda|nl\rangle$, con las cuales se construyó la matriz H , con elementos de matriz

En el caso $l=l'=2$, usamos la expresión (3.3), en tanto que, para $l=l'=0$ y $l=0, l'=2$, se usaron las expresiones deducidas en el capítulo anterior.

Obtenida la matriz H , se procedió a diagonalizarla, escogiéndose el eigenvalor mínimo, el cual es el valor de la energía de amarre predicha para un número dado de cuantos, y para una frecuencia del oscilador; el eigenvector correspondiente a este eigenvalor nos da los coeficientes S_n y D_n . (Ver sección (2.2)).

Para el T1 los cálculos fueron hechos hasta 30 cuantos, mientras que para el T2 se hicieron sólo hasta 24 cuantos.

La forma en que fueron comprobados los programas para estos -

cálculos fue la siguiente: por un lado, se reprodujeron los resultados obtenidos por Yeh para el potencial E y por otro lado, verificamos las propiedades variacionales de los elementos de matriz del hamiltoniano con respecto a las funciones de onda del oscilador armónico, encontrada por Flores et al.¹⁹⁾. Esto es, se verificó la relación

$$\begin{aligned}
 2\beta \frac{d}{d\beta} \langle m\ell_{11}|h|n\ell_{11} \rangle &= \sqrt{(2n+2\ell+3)(2n+2)} \langle m\ell_{11}|h|n+1\ell_{11} \rangle - \\
 &- \sqrt{(2n+2\ell+1)2n} \langle m\ell_{11}|h|n-1\ell_{11} \rangle + \sqrt{(2m+2\ell+3)(2m+2)} \langle m+1\ell_{11}|h|n\ell_{11} \rangle - \\
 &- \sqrt{(2m+2\ell+1)2m} \langle m-1\ell_{11}|h|n\ell_{11} \rangle.
 \end{aligned}
 \tag{3.4}$$

en donde β se ha definido como

$$\beta = \sqrt{\frac{\mu\omega'}{\hbar}}
 \tag{3.5}$$

y μ es la masa reducida del deuterón. La expresión anterior, en función de la variable adimensional ϵ , toma la forma:

$$\begin{aligned}
 4\epsilon \frac{d}{d\epsilon} \langle m\ell_{11}|h|n\ell_{11} \rangle &= \sqrt{(2n+2\ell+3)(2n+2)} \langle m\ell_{11}|h|n+1\ell_{11} \rangle - \\
 &- \sqrt{(2n+2\ell+1)2n} \langle m\ell_{11}|h|n-1\ell_{11} \rangle + \sqrt{(2m+2\ell+3)(2m+2)} \langle m+1\ell_{11}|h|n\ell_{11} \rangle - \\
 &- \sqrt{(2m+2\ell+1)2m} \langle m-1\ell_{11}|h|n\ell_{11} \rangle
 \end{aligned}
 \tag{3.6}$$

Esta relación se verificó gráficamente para los elementos de matriz

$\langle 00_{11}|h|20_{11} \rangle$ y $\langle 02_{11}|h|32_{11} \rangle$. Los elementos de -

matriz $\langle n'211|h|n011\rangle$ no fueron verificados en esta forma, ya que la propiedad variacional anterior sólo se cumple para elementos de matriz con $l=l'$.

3.2 Análisis de los resultados.

Antes de mostrar nuestras conclusiones, mencionaremos algunos de los resultados encontrados recientemente por W.W. Yeh⁷⁾, usando la base del oscilador y suponiendo interacciones nucleón-nucleón puramente centrales. Entre ellas se encuentra el potencial E , cuya parte radial consiste de una superposición de gaussianas, como en las interacciones estudiadas en este trabajo.

Debido a que los potenciales usados por Yeh sólo tienen parte central, la función de onda de prueba usada en sus cálculos es del tipo:

$$\psi = \sum_n a_n |n011\rangle \quad (3.7)$$

o sea solo contiene onda S ; en tanto que la función de onda de prueba que usamos para los potenciales T1 y T2 es de la forma:

$$\psi = \sum_n a_n |n011\rangle + \sum_n b_n |n211\rangle \quad (3.8)$$

Yeh mostró que una característica común a todos los potenciales puramente centrales, que constan de una superposición de gaussianas, es que al aumentar el número de cuantos, el eigenvalor mínimo se aproxima a la energía de amarre del deuterón. Pero esta aproximación no se lleva a ca-

bo en una forma uniforme, sino que se producen cambios apreciables en la energía de amarre predicha únicamente cuando se incrementa el número máximo de cuantos en cuatro unidades. En consecuencia, la curva de la energía en función de la frecuencia, para un número N de cuantos, es muy similar a la curva para $N+2$ cuantos y difiere apreciablemente de la curva para $N+4$ cuantos. En otras palabras, los resultados para cero y dos cuantos son muy parecidos entre sí, pero difieren del de cuatro cuantos; igualmente ocurre para cuatro y seis cuantos, ocho y diez, etc.

Otro resultado reportado por Yeh, es que al aumentar el número de cuantos, disminuye el valor de la frecuencia para la cual se encuentra la energía mínima.

Los números cuánticos de los estados son n y l , por lo tanto el número de cuantos es $N = 2n + l$; entonces para 8 cuantos, el número cuántico n va desde cero a cuatro para onda S ($l=0$); y desde cero hasta tres para onda D ($l=2$).

Los resultados para la energía del estado base, obtenidos para un número de cuantos N , son denotados por E_n , en donde n es el valor máximo de este número cuántico, para un número de cuantos dado ($N/2$). Así, los resultados obtenidos para la energía a 24 cuantos serán denotados por E_{12} . Además para distinguir los resultados para los potenciales T1 y T2, se indica entre paréntesis el potencial al que corresponden los resultados. Así, por ejemplo, $E_{12}(T1)$ es la curva de energía en función de la frecuencia del oscilador, obtenida para 24 cuantos con el potencial T1.

Para los potenciales T1 y T2 encontramos que al aumentar el número de cuantos, el mínimo en la energía se aproxima a la energía del estado base, en una forma cualitativamente similar a la encontrada por Yeh, a pesar de que estos potenciales contienen partes no centrales; la afirmación anterior proviene de que en los resultados obtenidos para estos potenciales, también se observan cambios apreciables al cambiar en cuatro el número de cuantos.

La diferencia entre nuestros resultados y los reportados por Yeh, consiste en que la curva para cero cuantos (Fig. 3.1), está bastante alejada de la curva correspondiente a dos cuantos; o sea que en nuestros resultados, encontramos un caso en el cual se logra una notable mejoría al incrementar en dos cuantos el número de estados, lo cual no sucede al usar potenciales puramente centrales. De forma que, mientras en los casos analizados por Yeh, las curvas E_0 y E_1 están muy cercanas, en nuestro caso encontramos que E_1 y E_2 son bastante parecidas, y como ya hemos mencionado E_0 se encuentra bastante alejada de ellas (Fig. 3.2).

Al aumentar el número de cuantos las curvas E_n y E_{n+1} están cada vez más cercanas, razón por la cual no mostramos los resultados para 14, 18 y 22 cuantos, ya que estos son muy similares a los resultados obtenidos para 16, 20 y 24 cuantos, respectivamente.

Para cero cuantos se tiene que para ambos potenciales E_0 es una función creciente y positiva de ϵ ($\epsilon = \hbar\omega/mc^2$), el parámetro adimensional correspondiente a la frecuencia del oscilador. La curva -

$E_0(T1)$ se encuentra arriba de la curva $E_0(T2)$. Lo anterior es fácilmente explicable, ya que a cero cuantos, sólo interviene la parte central de los potenciales, que presentan un carozo repulsivo bastante alto; el potencial T1 tiene un carozo repulsivo mayor que el correspondiente al potencial T2.

Las curvas E_1 y E_2 para ambos potenciales son funciones crecientes y positivas de ϵ , pero se encuentran muy por debajo de la curva para cero cuantos. Las curvas para el potencial T1, se vuelven a encontrar arriba de las correspondientes al potencial T2, con la característica de que, para el potencial T1, las curvas E_1 y E_2 se encuentran más cercanas entre sí que las curvas correspondientes en el caso del potencial T2. Para este último las curvas de energía E_1 y E_2 muestran un punto de inflexión (Fig. 3.2).

Las curvas para seis y ocho cuantos potenciales presentan un mínimo, el cual tiene un valor positivo (Fig. 3.3) y se vuelve a observar que las curvas para el potencial T1 están más próximas entre sí que las correspondientes al potencial T2.

Para 10 y 12 cuantos se obtiene un estado debilmente ligado, para ambos potenciales (Fig. 3.4), para valores de $\epsilon \approx 110$ para el potencial T1 y $\epsilon \approx 85$ para el potencial T2. El valor más cercano a la energía de amarre del deuterón corresponde al potencial T2. En los cálculos usando el potencial T1 se encuentra que el valor óptimo de la energía a 16 cuantos es de $E = -1.5$ MeV para $\epsilon = 100$, a 20 cuantos se obtiene - - -

$E = -1.91$ MeV a $\epsilon \approx 95$, para 24 cuantos la curva $E_{12}(T1)$ muestra un mínimo en $\epsilon = 90$, con un valor $E = -2.11$ MeV (Fig. 3.5). Para el potencial T2 se encuentran valores ligeramente mejores para la energía a 16 y 20 cuantos que los anteriores (Fig. 3.6), para 24 cuantos se encuentra prácticamente la misma energía que en el potencial T1, pero en todos los casos el valor de ϵ para el cual se alcanza el mínimo de las curvas de energía es menor en el potencial T2.

De los resultados obtenidos se observa claramente que usando los potenciales T1 y T2, nos acercamos a la energía del estado base en saltos de cuatro cuantos, mostrando además que en cuanto aumenta el número de cuantos, el valor de la frecuencia para el cual se logra la óptima energía disminuye.

Para 28 cuantos usando el potencial T1, se obtiene el mejor valor de la energía ($E = -2.21$ MeV) para $\epsilon = 85$, valor bastante cercano a la energía de amarre; para 30 cuantos encontramos que para valores de ϵ entre 67 y 104, la energía $E_{15}(T1)$ es mayor que la energía de amarre (Fig. 3.7), o sea que para estos valores de ϵ , el potencial T1 sobreliga ligeramente, el valor mínimo se obtiene en $\epsilon = 80$ y es de -2.27 MeV. Este resultado para el potencial T1, puede deberse a la forma en que fue construido este potencial, ya que al ajustar los defasamientos hay un ancho margen de error experimental, lo cual da lugar a una imprecisión en la determinación de los parámetros del potencial.

Para obtener la energía en función del número de cuantos, sólo con-

sideramos los valores de la energía de cuatro cuantos en cuatro cuantos (Fig. 3.8), observándose que a medida que aumenta el número de cuantos, la curva correspondiente al potencial T1, se acerca a la obtenida para el potencial T2, de manera que a 24 cuantos tiene prácticamente el mismo valor. Parece ser que si aumentamos el número de cuantos, obtendríamos para el potencial T1 valores de la energía mas grandes que la energía de amarre, lo cual nos hace sospechar que al aumentar el número de cuantos, la energía predicha por el potencial T1 tendería asintóticamente a un valor mayor que el encontrado a 30 cuantos. En contraste, el potencial T2 parece producir resultados asintóticos a la energía de amarre del deuterón. Para obtener una respuesta definitiva, se tendrían que llevar a cabo cálculos a mayor número de cuantos.

Por último analizaremos los eigenvectores mayores, tanto para la onda S como para la onda D, los cuales nos proporcionan el traslape de la función de onda de prueba a un cierto número de cuantos, con los estados $|0011\rangle$ y $|0211\rangle$.

También mostramos la probabilidad de encontrar a la función de onda de prueba en los estados $|0011\rangle$ y $|0211\rangle$, que son denotados por $|\langle\psi|0011\rangle|^2$ y $|\langle\psi|0211\rangle|^2$ respectivamente, en función del número de cuantos (Fig. 3.9).

Las curvas fueron trazadas usando solamente los resultados a 8, 12, 16, etc. cuantos, ya que hay cambios notables en estas probabilidades sólo al variar el número máximo de cuantos en cuatro, la razón para presentar

resultados solamente a partir de 8 cuantos, es que antes de él, no se observó ningún mínimo en la gráfica de energía contra frecuencia.

Para el potencial T1, vemos que de 8 a 16 cuantos las amplitudes $|\langle \psi | 0011 \rangle|^2$ y $|\langle \psi | 0211 \rangle|^2$ disminuyen, siendo más pequeña la disminución en el segundo caso; entre 16 y 24 cuantos $|\langle \psi | 0011 \rangle|^2$ aumenta rápidamente, hasta alcanzar su valor máximo a 24 cuantos, el cual es cercano al 70 % y para 28 cuantos disminuye bruscamente al 59.1 %; después de 16 cuantos $|\langle \psi | 0211 \rangle|^2$ disminuye notablemente y a partir de los 24 cuantos aumenta ligeramente. Nótese que después de 16 cuantos, al aumentar $|\langle \psi | 0011 \rangle|^2$ disminuye $|\langle \psi | 0211 \rangle|^2$, y en tanto que $|\langle \psi | 0011 \rangle|^2$ alcanza un máximo, $|\langle \psi | 0211 \rangle|^2$ llega a su valor mínimo.

Para el potencial T2, $|\langle \psi | 0011 \rangle|^2$ disminuye al aumentar el número de cuantos, de 8 a 16 cuantos disminuye rápidamente, en tanto que para 16 y 20 cuantos es muy parecido, siendo ligeramente mayor para 20 cuantos, al aumentar a 24 cuantos se observa que $|\langle \psi | 0011 \rangle|^2$ disminuye; respecto a $|\langle \psi | 0211 \rangle|^2$ se observa que varía muy poco con el número de cuantos, manteniendo su valor muy cercano al 4 %.

Los resultados anteriores muestran que antes de 20 cuantos, la función de onda de prueba para el potencial T2, tiene una componente mayor de $|0011\rangle$ que la función de prueba para el potencial T1; después de 20 cuantos es menor para el potencial T2 que para el potencial T1.

De los resultados anteriores, observamos que tenemos que ir has-

ta números de cuantos altos, ya que la función de onda de prueba tiene gran parte de $|0011\rangle$, que, debido a los fuertes carozos repulsivos de los potenciales, da una contribución fuertemente repulsiva a la energía.

En conclusión, hemos encontrado que para potenciales con partes no centrales, pero cuya parte radial es una superposición de gaussianas, la energía se acerca a la energía del estado base, de una manera cualitativamente igual a la mostrada por potenciales centrales, que consten de una superposición de gaussianas (Feenberg, E, etc.). El potencial T1 sobreliga ligeramente y de los potenciales usados el mejor es el T2, aún cuando éste último sólo ajusta los datos de dispersión hasta 100 MeV. Por último, el hecho de usar la base de funciones del oscilador, nos fuerza a llevar nuestros cálculos hasta un número considerable de cuantos para poder obtener resultados razonables para la energía. Esto se debe en buena parte a la contribución repulsiva de los elementos de matriz $\langle 0011|H|0011\rangle$.

Fué debido a este último punto, que surgió la idea de construir una base de funciones en que se tomara en cuenta que los carozos eran altos y que al mismo tiempo tuviera la ventaja de manejarse con las técnicas desarolladas para la base del oscilador: o sea poder obtener expresiones analíticas para todos los elementos de matriz.

En los capítulos siguientes explicamos en detalle una manera de -- construir tal base de funciones, así como los resultados obtenidos.

3.3 Indice de Figuras.

- Fig. 3.1: Curvas de energía a cero cuantos en función de ϵ , ($\epsilon = \hbar\omega/mc^2$), $E_0(T1)$ y $E_0(T2)$, para los potenciales T1 y T2. La energía se da en MeV. en esta y en las siguientes figuras.
- Fig. 3.2: Energías $E_1(T1)$, $E_2(T1)$, $E_1(T2)$ y $E_2(T2)$ para dos y cuatro cuantos, usando la base del oscilador armónico, para los potenciales T1 y T2.
- Fig. 3.3: Energías para seis y ocho cuantos (E_3, E_4) usando los potenciales T1 y T2 usando la base de oscilador.
- Fig. 3.4: Energías E_5 , E_6 para diez y doce cuantos respectivamente con los potenciales T1 y T2, usando la base de oscilador.
- Fig. 3.5: Energías $E_8(T1)$, $E_{10}(T1)$, $E_{12}(T1)$ en función del parámetro ϵ , usando funciones de oscilador para dieciséis, veinte y veinticuatro cuantos respectivamente, para el potencial T1.
- Fig. 3.6: Energías $E_8(T2)$, $E_{10}(T2)$, $E_{12}(T2)$ en función de ϵ , para dieciséis, veinte y veinticuatro cuantos respectivamente, para el potencial T2.
- Fig. 3.7: Energías $E_{14}(T1)$, $E_{15}(T1)$ para veintiocho y treinta cuantos, para el potencial T1. Nótese que la curva para treinta cuantos sobreliga ligeramente.
- Fig. 3.8: Energía de amarre del deuterón como función del número de -- cuantos, para los potenciales T1 y T2. El número de cuantos se varió de cuatro en cuatro.
- Fig. 3.9: Amplitudes $|\langle \psi | 0011 \rangle|_{T1}^2$, $|\langle \psi | 0211 \rangle|_{T1}^2$ para el potencial T1, y $|\langle \psi | 0011 \rangle|_{T2}^2$, $|\langle \psi | 0211 \rangle|_{T2}^2$ para el potencial T2, en función del número de cuantos, nótese que para el potencial T2 solo se llega a veinticuatro cuantos y que el número de cuantos se varió de cuatro en cuatro.

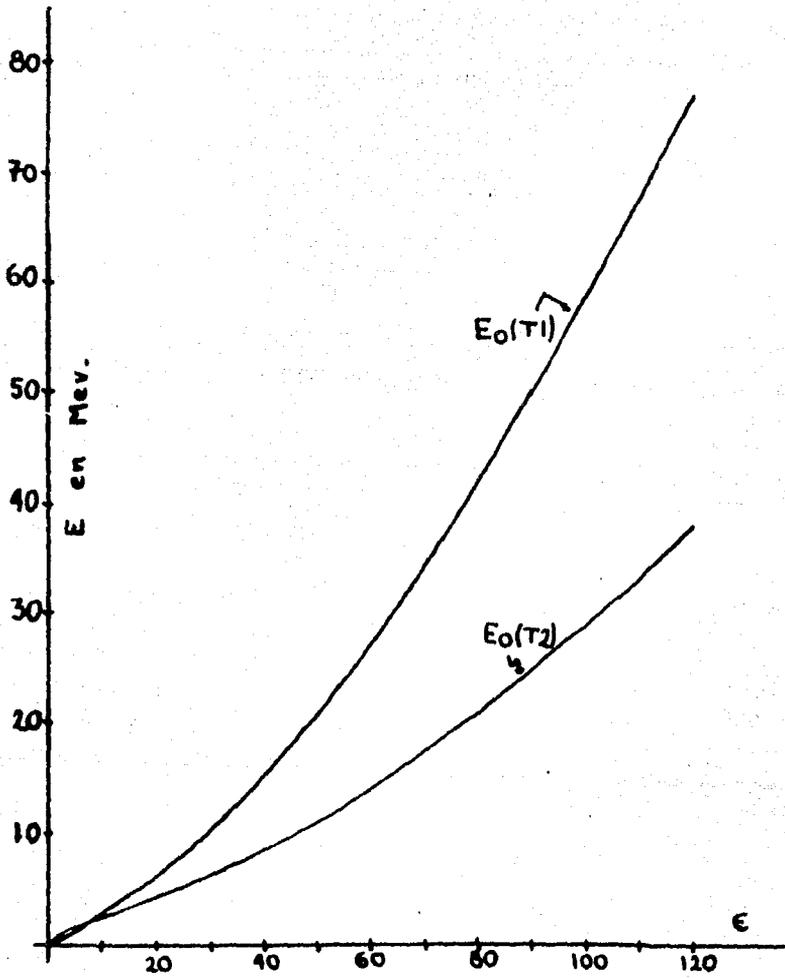


Fig. 3.1

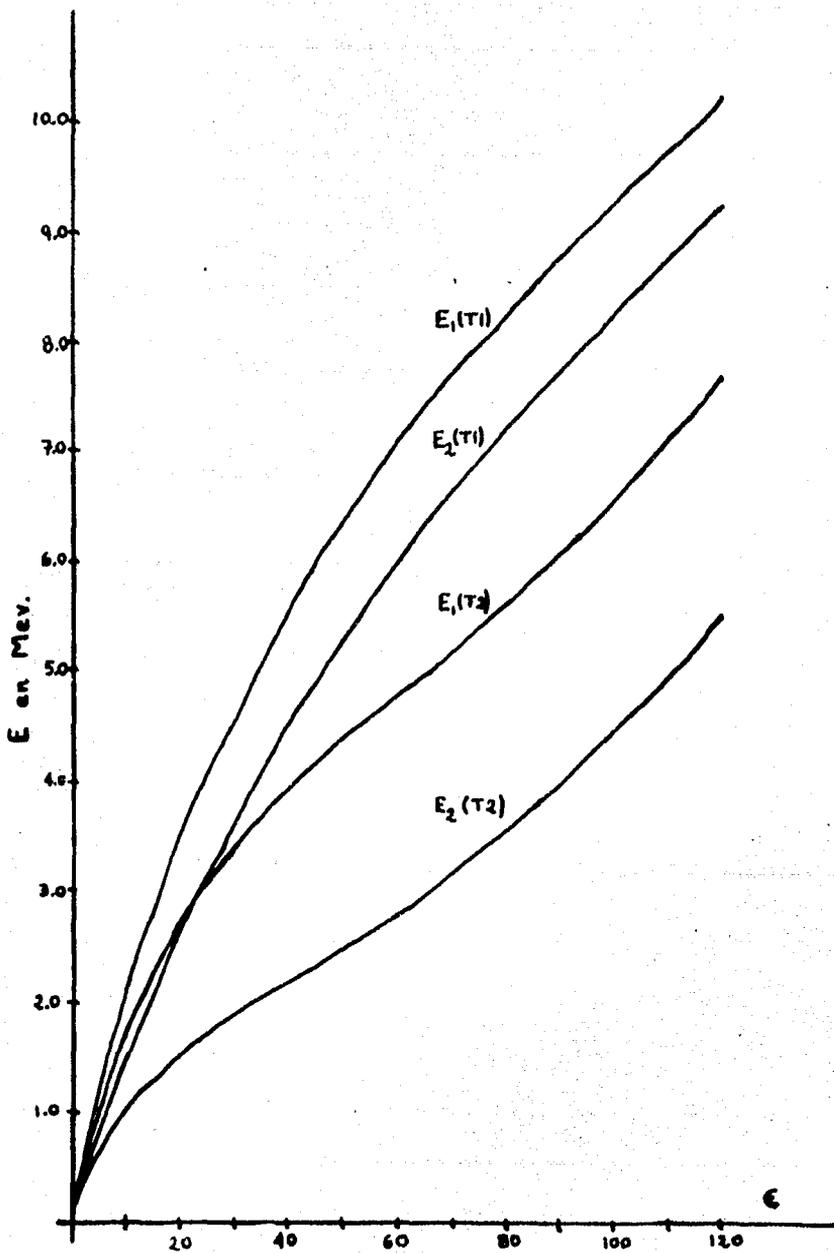


Fig. 3.2

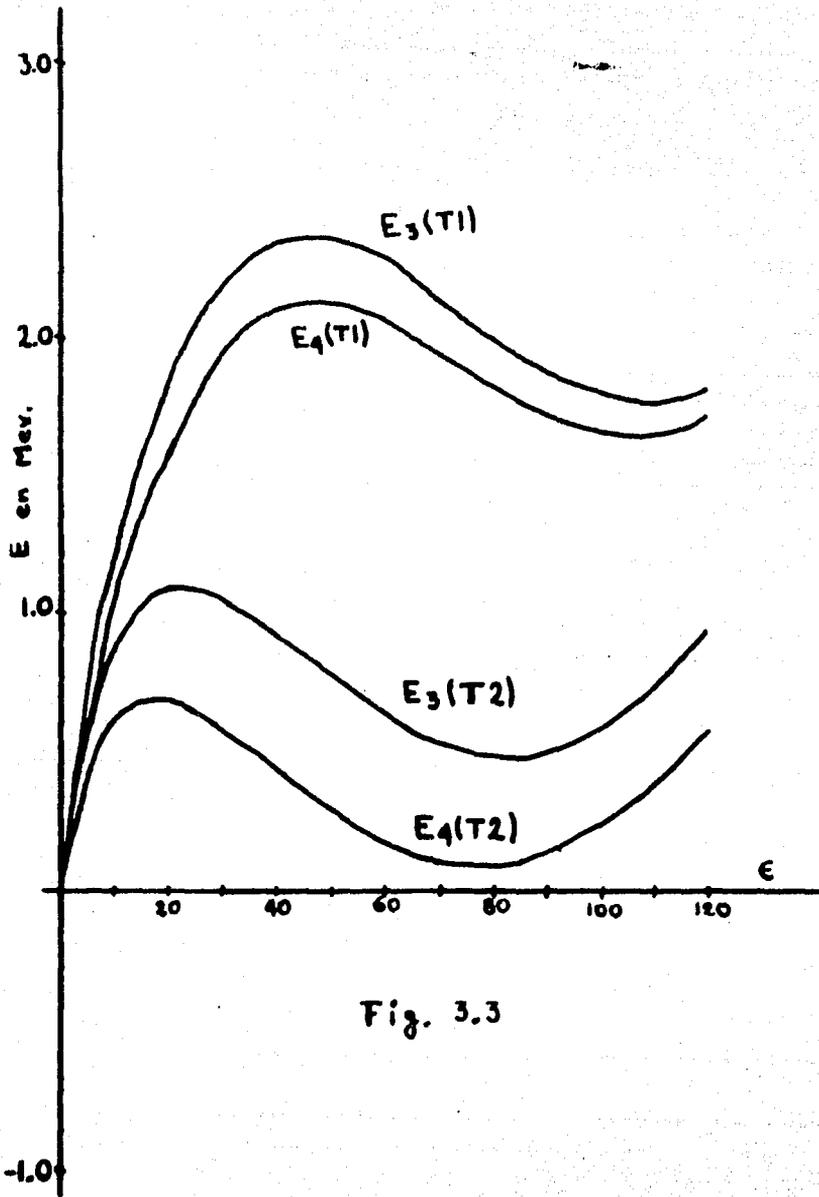


Fig. 3.3

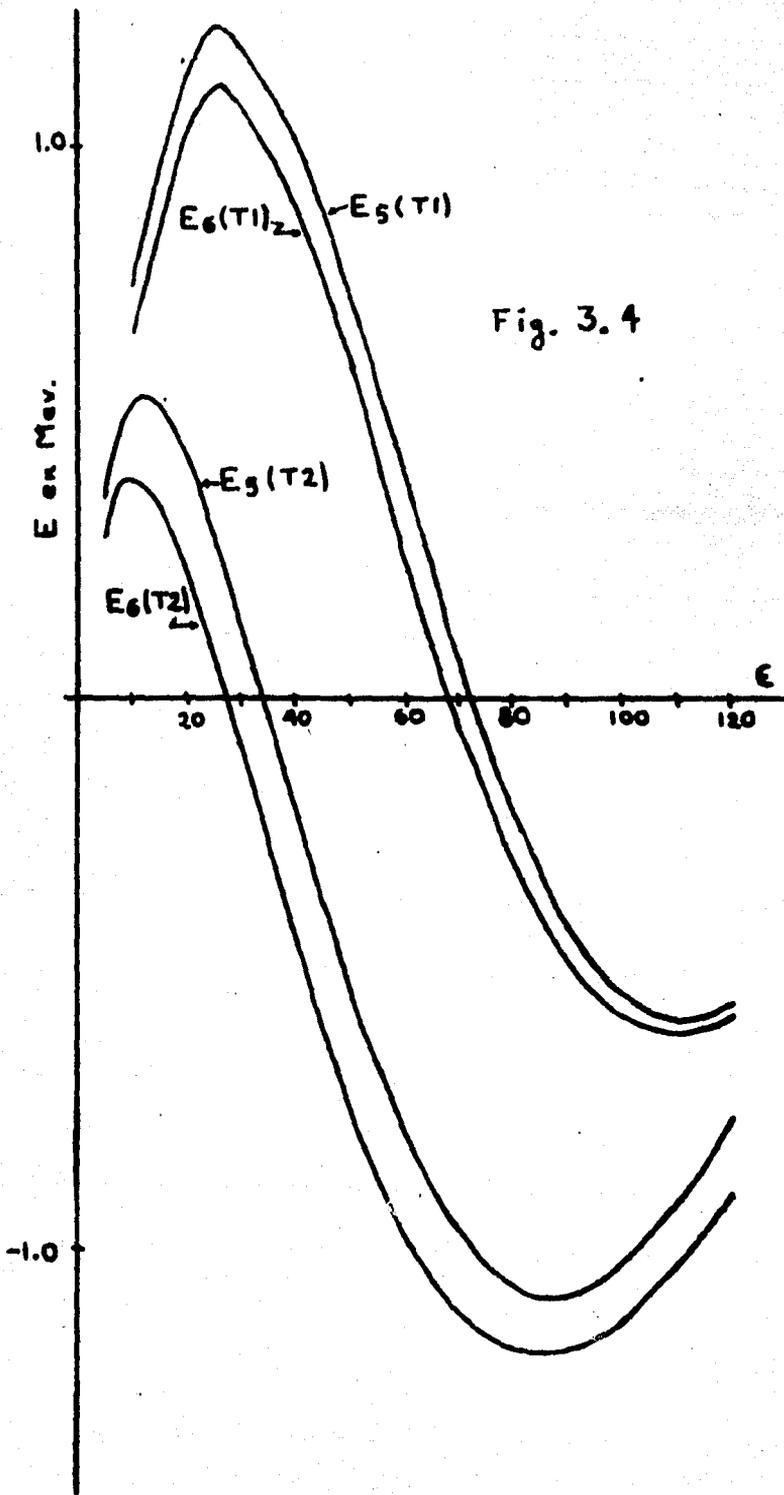
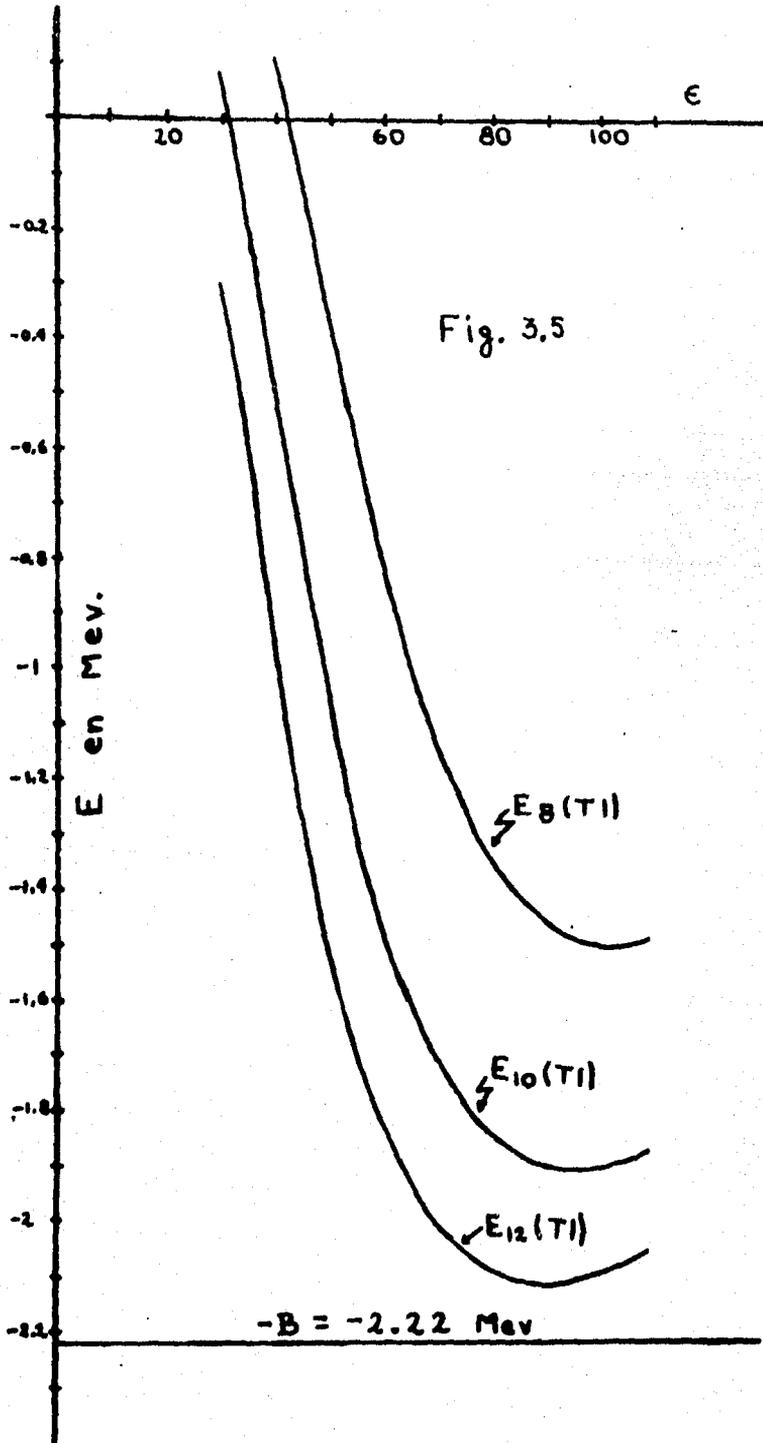


Fig. 3.4



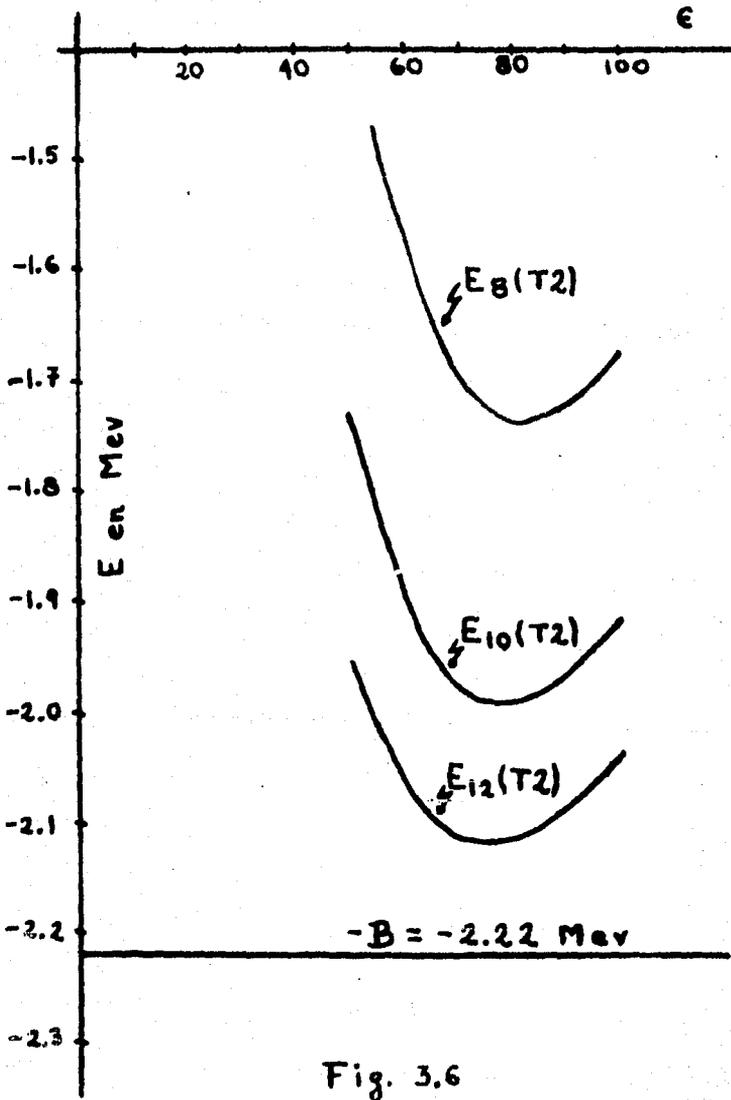
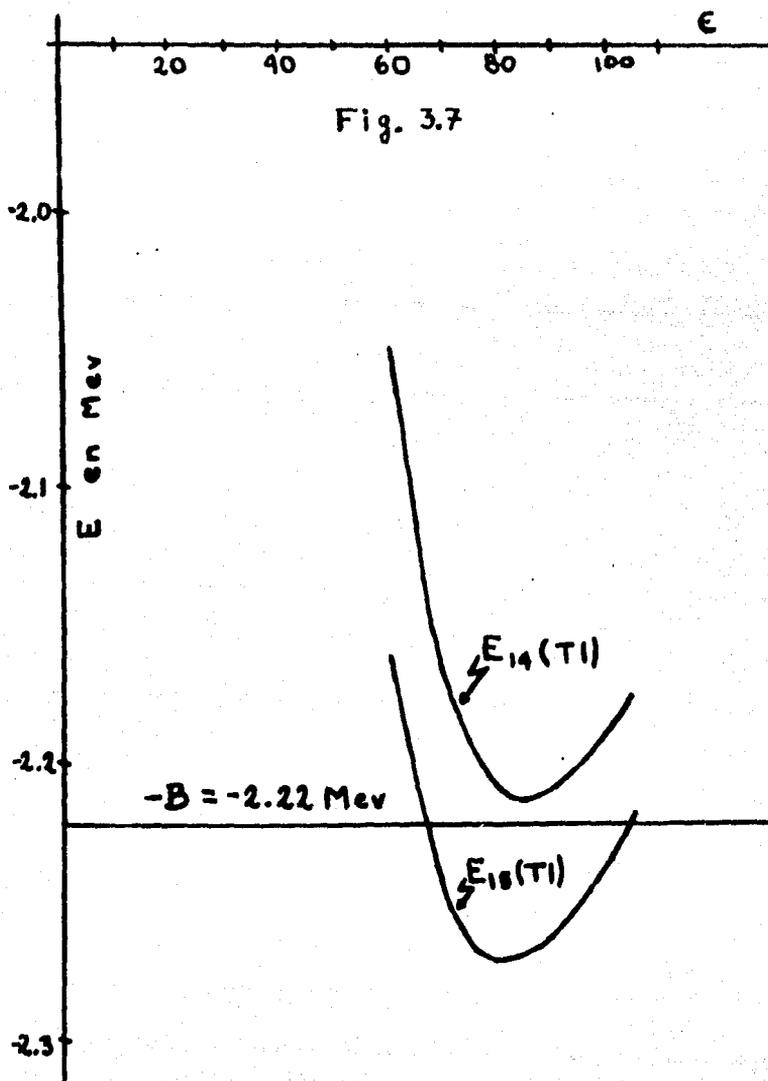
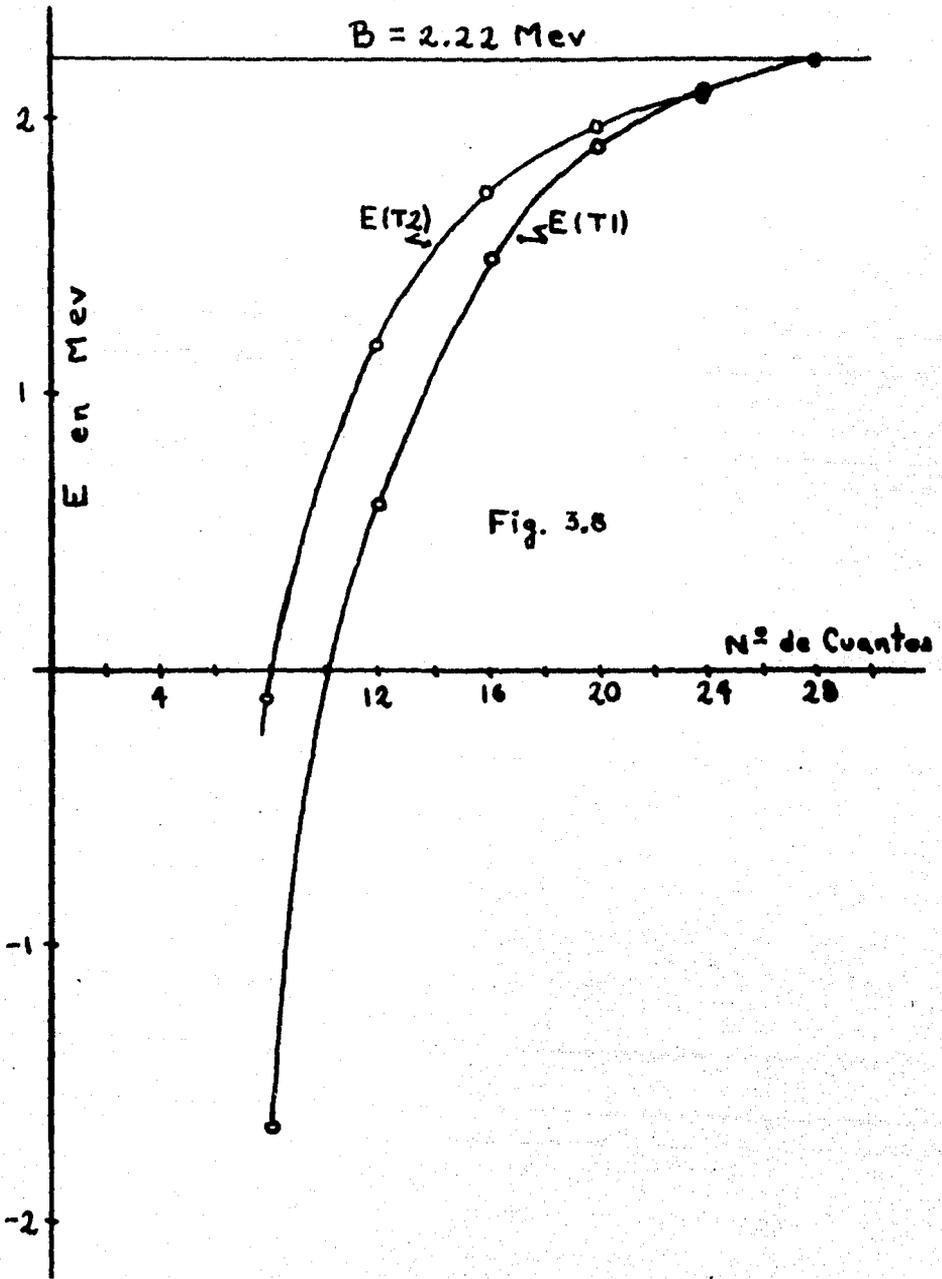


Fig. 3.6



BIBLIOTECA CENTRAL
U. N. A. S. M.



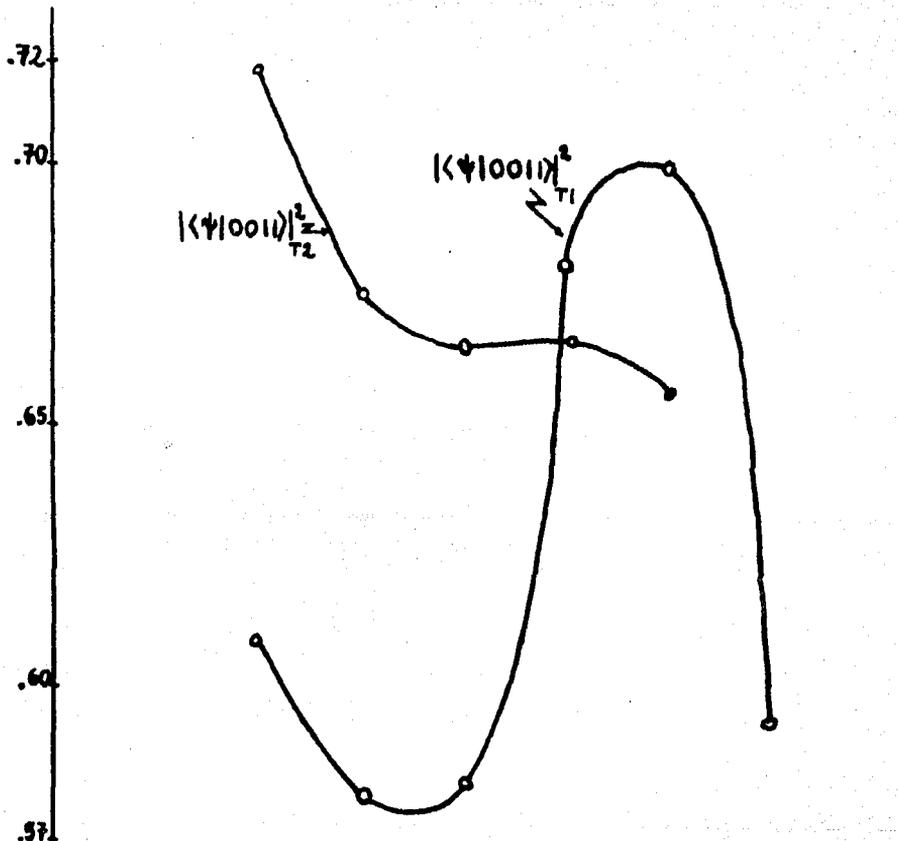
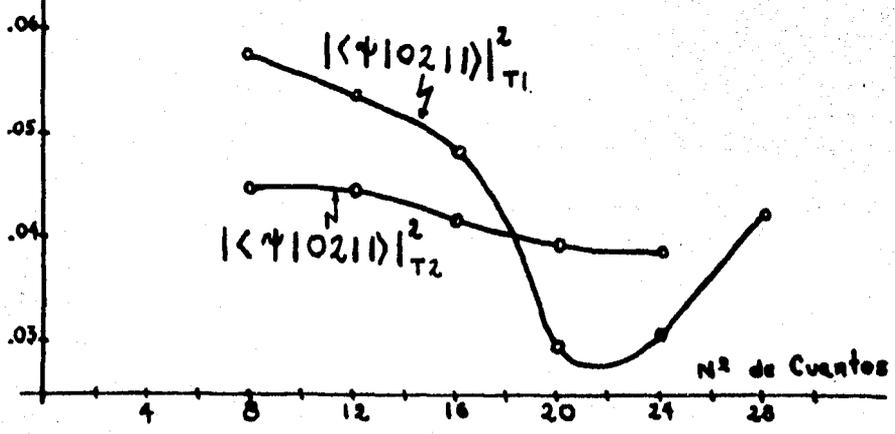


Fig. 3.9



CAPITULO IV

4.1 Funciones de onda correlacionadas.

Los resultados obtenidos en el cálculo variacional para poder ajustar la energía de amarre del deuterón usando la base de funciones de onda de oscilador armónico y suponiendo una interacción nucleón-nucleón que consiste en su parte radial de una superposición de gaussianas, requiere el uso de un número muy grande de funciones de oscilador para poder ajustar la energía del estado base. Esto se debe a la fuerte contribución positiva de los elementos de matriz $\langle 0011 | h | 0011 \rangle$. Lo anterior nos lleva a preguntarnos si no es posible encontrar otra base de funciones de onda que nos permita reproducir el estado base con un número relativamente pequeño de ellas y tal que los elementos de matriz del hamiltoniano sean fácilmente evaluables.

Para resolver esta cuestión construiremos una base de funciones correlacionadas del tipo propuesto por Jastrow¹⁴⁾ y desarrollada recientemente por Clark et al.¹⁵⁾. Aún cuando estas técnicas son usadas para potenciales con carozo duro, son directamente aplicables a nuestros potenciales con carozo blando. Haciendo uso de este tipo de funciones correlacio-

nadas, Ciofi ¹⁶⁾ logró un buen ajuste con los datos experimentales para el factor de forma de ⁶Li, tomando en cuenta las correlaciones de dos cuerpos provenientes de los carozos repulsivos de la interacción nucleón--nucleón. Para sus cálculos Ciofi hace uso de una densidad del estado base del tipo propuesto por Jastrow, la cual es de la forma :

$$\rho(1, \dots, A) = |\psi(1, \dots, A)|^2 \prod_{i < j} F(r_{ij}) \quad (4.1)$$

donde ψ es la función de onda del estado base antisimetrizada y define la función de correlación

$$F(r_{ij}) = 1 - \exp(-r_{ij}/b^2) \quad (4.2)$$

$$r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$$

imponiendo en esta forma las condiciones

$$\lim_{r_{ij} \rightarrow 0} F(r_{ij}) = 0$$

$$F(r_{ij}) \simeq 1 \quad \text{si } r_{ij} \geq r_h \quad (4.3)$$

Aquí, r_h es la llamada distancia de "curación" de la función de onda que describe el movimiento relativo de dos nucleones.

La idea básica del formalismo de bases de funciones correlacionadas ¹⁵⁾ (C.B.F.), es que la función de onda que caracteriza a un sistema de A nucleones cuyo hamiltoniano es de la forma :

$$H = - \sum_{i=1}^A \frac{\hbar^2}{2M} \nabla_i^2 + \sum_{i < j} \psi(i, j) \quad (4.4)$$

donde $\psi(i, j)$ es un potencial nucleón-nucleón, debe ser tal que para $r_{ij} \rightarrow 0$, la función de onda $\psi(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_A)$ tienda a cero. Lo anterior sugiere usar una función de prueba del siguiente tipo

$$\psi = F \Phi \quad (4.5)$$

donde F es un factor de correlación real y simétrico en las coordenadas de las partículas y Φ es una función modelo, que contiene las propiedades de simetría y estadística del sistema bajo consideración.

Nuestro factor de correlación es de la forma propuesta por Jastrow¹⁴⁾

$$F = \prod_{i < j} f(r_{ij}) \quad (4.6)$$

en donde

$$\lim_{r_{ij} \rightarrow 0} f(r_{ij}) = 0$$

$$\lim_{r_{ij} \rightarrow r_0} f(r_{ij}) = 1 \quad r_0 \gg \epsilon \quad (4.7)$$

siendo r_0 el radio del carozo.

Sea $\{ \Phi_m \}$ un conjunto completo ortonormal de funciones de partícula independiente. Este conjunto sería útil para tratar las propiedades más importantes del sistema, si no estuviera presente la fuerte repulsión a cortas distancias. Sin embargo este conjunto completo nos servirá para construir un nuevo conjunto de funciones de onda correlacionadas normalizadas, pero no ortogonales entre sí y definidas como ¹⁵⁾:

$$\left\{ \psi_m \mid \psi_m = \frac{F \Phi_m}{\sqrt{\langle \Phi_m \mid F^2 \mid \Phi_m \rangle}} \right\} \quad (4.8)$$

con esta base de funciones correlacionadas se calculan los elementos de matriz del hamiltoniano, así como los del operador identidad, o sea:

$$h_{mn} = \langle \psi_m \mid h \mid \psi_n \rangle \quad (4.9)$$

$$\eta_{mn} = \langle \psi_m \mid \psi_n \rangle \quad (4.10)$$

Veamos ahora que forma toma el problema de eigenvalores. Expresando nuestra función de onda de prueba como una combinación lineal de las ψ_m tenemos:

$$\psi = \sum_m c_m \psi_m \quad (4.11)$$

y el valor esperado del hamiltoniano será

$$\langle h \rangle = \frac{\langle \psi | h | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \frac{\sum_n c_m^* c_n \langle \psi_m | h | \psi_n \rangle}{\sum_{p,q} c_p^* c_q \langle \psi_p | \psi_q \rangle} \quad (4.12)$$

El mejor valor que podemos obtener para la energía, usando funciones de prueba del tipo (4.11), es algún valor estacionario relativo a las c_m o a las c_m^* , con lo cual la condición extremal toma la forma:

$$\frac{\partial \langle h \rangle}{\partial c_r^*} = 0 \quad \forall r \quad (4.13)$$

Usando la expresión (4.12) es fácil ver que la condición extremal queda expresada como:

$$\sum_n c_n (h_{rn} - \langle h \rangle \eta_{rn}) = 0 \quad (4.14)$$

La expresión anterior nos lleva al problema secular:

$$\det | h_{rn} - E \eta_{rn} | = 0 \quad (4.15)$$

Este problema puede ser resuelto usando técnicas de diagonalización simultánea para las matrices h y η . Sin embargo es conveniente matemáticamente y para propósitos de interpretación física, transformar de nuestro conjunto de funciones correlacionadas no ortogonales a uno ortogonal, antes de calcular los eigenvalores de la energía.

Para resolver nuestro problema seguiremos los pasos siguientes:

a) Evaluación de los elementos de matriz del hamiltoniano en las bases co

rrrelacionadas no ortogonales, así como los elementos de matriz del opera-
dor identidad.

b) Transformar el conjunto correlacionado no ortonormal a un nuevo con-
junto de funciones correlacionadas y ortonormalizadas respecto a las cua-
les el operador hamiltoniano y el identidad tienen elementos de matriz

$$A_{mn} \text{ y } N_{mn} = \delta_{mn}.$$

c) Diagonalización de la matriz A_{mn} .

Es conveniente hacer notar que debido a que $N_{mn} = \delta_{mn}$ la
transformación que nos lleva de la base $\{\Phi_m\}$ a la base $\{\theta_m\}$,
la cual está ya correlacionada y ortonormalizada, es una transformación
unitaria ¹⁵⁾.

4.2 Transformación de Löwdin.

Como es fácil observar, las funciones correlacionadas, al no ser
ortogonales, no permiten una interpretación directa del problema físico co-
mo la que es posible hacer con las funciones no correlacionadas. El pro-
blema secular se complica debido a la no ortogonalidad de la base, por lo
que es conveniente transformar el conjunto original $\{\psi_m\}$ a un conjun-
to correlacionado $\{\theta_m\}$, lo cual puede lograrse por medio de la trans-
formación de Löwdin ¹⁵⁾.

La ley de transformación para pasar al nuevo conjunto se puede -
expresar en forma compacta, si interpretamos $\{\psi_m\}$ y $\{\theta_m\}$.

como los vectores renglón ψ y \textcircled{H} respectivamente, y denotamos la matriz con elementos η_{mn} por η . Tenemos entonces:

$$\textcircled{H} = \psi \eta^{-1/2} \quad (4.16)$$

Veremos ahora como esta transformación nos lleva efectivamente a una nueva base ortonormal, para lo cual demostraremos que

$$\tilde{\textcircled{H}} \textcircled{H} = I \quad (4.17)$$

La matriz η , la podemos expresar como la suma de la matriz unidad y de la desviación J de ella, o sea

$$\eta = I + J \quad (4.18)$$

La matriz J tiene elementos de matriz

$$J_{mm} = 0 \quad (4.19)$$

$$J_{mn} = \eta_{mn} \quad m \neq n$$

Usando un desarrollo matricial binomial, podemos calcular $\eta^{-1/2}$ en la siguiente forma

$$\eta^{-1/2} = (I + J)^{-1/2} = I - \frac{1}{2} J + \frac{3}{8} J^2 - \frac{5}{16} J^3 + \dots \quad (4.20)$$

De la expresión anterior vemos que si η es real y hermitiana, $\eta^{-1/2}$ también lo es.

Recordando la definición de η , así como la del vector ψ tenemos

$$\tilde{\psi} \psi = \eta \quad (4.21)$$

Calculemos ahora $\tilde{\mathbb{H}} \mathbb{H}$

$$\tilde{\mathbb{H}} \mathbb{H} = (\tilde{\psi} \eta^{-1/2}) (\psi \eta^{-1/2}) = \tilde{\eta}^{-1/2} \tilde{\psi} \psi \eta^{-1/2} = \tilde{\eta}^{-1/2} \eta \eta^{-1/2}$$

y de aquí

$$\tilde{\mathbb{H}} \mathbb{H} = \eta^{-1/2} \eta \eta^{-1/2} \quad (4.22)$$

Del desarrollo de $\eta^{-1/2}$ vemos claramente que $\eta^{-1/2}$ y η conmutan, o sea $\eta^{-1/2} \eta = \eta \eta^{-1/2}$. Usando este resultado, tenemos

$$\tilde{\mathbb{H}} \mathbb{H} = \eta^{-1/2} \eta^{-1/2} \eta = \eta^{-1} \eta = \mathbb{I} \quad (4.23)$$

Hemos demostrado que la transformación de Löwdin dada en (4.16) nos permite pasar a una base correlacionada y normalizada.

La convergencia del desarrollo (4.20) será rápida, si la desviación de F de la unidad, ocurre en una pequeña región del espacio de configuración. La transformación de Löwdin es pues apropiada para nuestro problema.

Veamos ahora cual va a ser la representación del hamiltoniano en la base $\{ \theta_m \}$. Definimos la matriz A como aquella que está for-

mada por los elementos $A_{mn} = (\theta_m | h | \theta_n)$ o sea:

$$A = \hat{\Theta} \hat{h} \Theta = \eta^{-1/2} \tilde{\psi} \hat{h} \psi \eta^{-1/2} = \eta^{-1/2} h \eta^{-1/2} \quad (4.24)$$

en donde $h_{mn} = (\psi_m | h | \psi_n)$

Estamos ahora en posición de poder resumir nuestro ataque al problema:

- a) Evaluación de los elementos de matriz h_{mn} y η_{mn} del hamiltoniano y el operador identidad, con respecto al conjunto de funciones correlacionadas $\{\psi_m\}$.
- b) Transformación del conjunto $\{\psi_m\}$ al conjunto $\{\theta_m\}$, usando la transformación de Löwdin, y cálculo de los elementos de matriz A_{mn} y N_{mn} en esta representación.
- c) Diagonalización de la matriz A y obtención de los eigenvalores y eigenvectores.

4.3 Aplicación de correlaciones en el deuterón.

Nuestro primer problema, en el caso del deuterón, consiste en escoger la base de funciones ortonormales no correlacionadas, así como la forma explícita del factor de correlación.

Usaremos como base no correlacionada al conjunto de funciones de onda de oscilador armónico definidas por:

$$|nls_j\rangle = R_n e^{i m_j \phi} |e_s j\rangle \quad (4.25)$$

La base correlacionada no ortonormal será entonces de la forma

$$|nls_j\rangle_c = \frac{F(r_{12}) |nls_j\rangle}{\sqrt{\langle nls_j | F^2(r_{12}) |nls_j\rangle}} \quad (4.26)$$

Como sabemos que para el deuterón ℓ sólo puede tomar los valores cero y dos, y que se trata de un estado triplete con $j=1$, la función de onda de prueba que usaremos será la siguiente:

$$\psi = \sum_{q=0}^{N/2} C_q |n(q) \ell(q) 1\rangle_c \quad (4.27)$$

en donde N es el número de cuantos y $n(q)$ y $\ell(q)$ se definen por las relaciones:

$$n(q) = q \text{ módulo } (N/2 + 1) = \begin{cases} q & q \leq N/2 \\ q - (N/2 + 1) & q > N/2 \end{cases} \quad (4.28)$$

$$\ell(q) = \begin{cases} 0 & q \leq N/2 \\ 2 & q > N/2 \end{cases} \quad (4.29)$$

El factor de correlación que usaremos, fue escogido de forma que fuera independiente del momento angular orbital, independiente del momento angular orbital, independiente de las diferentes partes del potencial (central, tensorial, etc.) y tal que los elementos de matriz $\langle n' \ell' s_j | F^2(r_{12}) | n \ell s_j \rangle$

fueran fácilmente calculables.

El factor de correlación usado fué

$$F(r_{12}) = 1 - b \exp(-a r_{12}^2) \quad (4.30)$$

Es fácil ver que este factor de correlación cumple con las condiciones

$$\lim_{r_{12} \rightarrow 0} F(r_{12}) = 0$$

$$\lim_{r_{12} \rightarrow r_0} F(r_{12}) = 1 \quad r_0 \gg r_c \quad (4.31)$$

siendo r_c el radio del carozo.

Los valores de a y b se encontrarán haciendo un análisis variacional para la energía, a un número dado de cuantos. Esta es función de tres parámetros, los parámetros de correlación a y b , y la frecuencia del oscilador.

4.4 Cálculo de los elementos de matriz del operador identidad y de la energía cinética en las bases correlacionadas¹⁸⁾.

Recordemos la definición de los kets $|ls_j\rangle$ y $|nl\rangle$ la cual es:

$$|ls_j\rangle = Y_{ls_j}^{m_j} \quad (4.32)$$

$$|nl\rangle = R_{nl} \quad (4.33)$$

De la definición dada en la expresión (4.10), tenemos que los elementos de matriz del operador identidad son

$$\eta_{n(\alpha)l(\alpha), n(\beta)l(\beta)} = \langle n(\alpha)l(\alpha) || I || n(\beta)l(\beta) \rangle \quad (4.34)$$

Si aplicamos la definición de las funciones correlacionadas dada en la expresión (4.26) tenemos :

$$\begin{aligned} \eta_{n(\alpha)l(\alpha), n(\beta)l(\beta)} &= \\ &= \frac{\langle n(\alpha)l(\alpha) || I^2 || n(\beta)l(\beta) \rangle}{\sqrt{\langle n(\alpha)l(\alpha) || I^2 || n(\alpha)l(\alpha) \rangle \langle n(\beta)l(\beta) || I^2 || n(\beta)l(\beta) \rangle}} \\ &= \frac{(n(\alpha)l(\alpha) | I^2 | n(\beta)l(\beta)) \langle l(\alpha) || I || l(\beta) \rangle}{\sqrt{(n(\alpha)l(\alpha) | I^2 | n(\alpha)l(\alpha)) \langle l(\alpha) || I || l(\alpha) \rangle (n(\beta)l(\beta) | I^2 | n(\beta)l(\beta)) \langle l(\beta) || I || l(\beta) \rangle}} \end{aligned} \quad (4.35)$$

y usando las propiedades de ortogonalidad de las $|l_s\rangle$ se tiene:

$$\begin{aligned} \eta_{n(\alpha)l(\alpha), n(\beta)l(\beta)} &= \\ &= \frac{(n(\alpha)l(\alpha) | I^2 | n(\beta)l(\beta)) \delta_{l(\alpha), l(\beta)}}{\sqrt{(n(\alpha)l(\alpha) | I^2 | n(\alpha)l(\alpha)) (n(\beta)l(\beta) | I^2 | n(\beta)l(\beta))}} \end{aligned} \quad (4.36)$$

De la ecuación anterior se ve fácilmente que F no podrá conectar estados con distinto momento angular orbital y en el caso en que α sea igual a β , o sea para elementos diagonales, su valor es 1. Por lo tanto

$$\int n(\alpha) \ell(\alpha) n(\beta) \ell(\beta) d\alpha d\beta = 0 \quad \text{si } \ell(\alpha) \neq \ell(\beta) \quad (4.37)$$

Obtendremos los elementos de matriz $(n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2 | n(\beta) \ell(\beta))$ para lo cual pasaremos a las variables adimensionales \vec{r} y \vec{p} dadas por:

$$\vec{r}_{12} = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu \omega}} \vec{r} \quad (4.38)$$

$$\vec{p}_{12} = \sqrt{\mu \hbar \omega} \vec{p}$$

en donde μ es la masa reducida de dos nucleones.

En función de las variables adimensionales, el factor de correlación toma la forma:

$$F(r) = 1 - b \exp(-sr^2) \quad (4.39)$$

en donde $s = 2 \left(\frac{\hbar^2}{M m c^2} \right) \frac{a}{\epsilon}, \quad \epsilon = \frac{\hbar \omega}{m c^2}$

M es la masa de un nucleón y m la masa del electrón.

De lo anterior vemos que el elemento de matriz toma la forma:

$$\begin{aligned}
 \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2(r) | n(\beta) \ell(\beta) \rangle &= \delta_{\ell(\alpha), \ell(\beta)} \left[\langle n(\alpha) \ell(\alpha) | n(\beta) \ell(\beta) \rangle - \right. \\
 &\quad - 2b \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | \exp(-sr^2) | n(\beta) \ell(\beta) \rangle + \\
 &\quad \left. + b^2 \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | \exp(-2sr^2) | n(\beta) \ell(\beta) \rangle \right] \quad (4.40)
 \end{aligned}$$

Los elementos de matriz de la derecha se pueden evaluar usando la relación de ortogonalidad de las funciones radiales de oscilador armónico, así como los coeficientes $B(n', \ell', n, \ell, p)$ ¹²⁾ y las integrales de Talmi¹⁷⁾, definidas en el capítulo 2. Usando lo anterior se tiene:

$$\begin{aligned}
 \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2(r) | n(\beta) \ell(\beta) \rangle &= \delta_{\ell(\alpha), \ell(\beta)} \left[\delta_{n(\alpha), n(\beta)} + \right. \\
 &\quad \left. + b \left\{ \sum_{p=\ell(\alpha)}^{\ell(\alpha)+n(\alpha)+n(\beta)} B(n(\alpha), \ell(\alpha), n(\beta), \ell(\beta), p) \left(\frac{b}{\left(1 + \frac{4Ka}{\epsilon}\right)^{p+3/2}} - \frac{2}{\left(1 + \frac{2Ka}{\epsilon}\right)^{p+3/2}} \right) \right\} \right] \quad (4.41)
 \end{aligned}$$

en donde K está definida como

$$K = \frac{\hbar^2}{m c^2} = 81.1966 \text{ fm}^2 \quad (4.42)$$

Con la expresión (4.41) podemos calcular los elementos de matriz del operador identidad haciendo uso de la expresión (4.36). La matriz η , será una matriz simétrica y real que para un número N de cuantos, tiene dimensión $(N+1) \times (N+1)$ y consta de dos bloques separados, como

se muestra esquemáticamente:

	$N/2+1$	$N/2$
$N/2+1$	$l=0$	0
$N/2$	0	$l=2$

Antes de evaluar los elementos de matriz de la energía cinética, demostraremos algunos resultados auxiliares. Calcularemos los elementos de matriz del operador adimensional p^2 definido en (4.38), ya que de ellos es inmediato el cálculo para la energía cinética. Para ello veamos cual es el efecto del operador p^2 sobre las funciones de onda del oscilador armónico que se denotan por el ket

$$|nl\rangle = R_{nl} Y_l^m \quad (4.43)$$

Deseamos encontrar una expresión para

$$p^2 |nl\rangle = 2 \left[\frac{1}{2} (p^2 + r^2) - \frac{r^2}{2} \right] |nl\rangle \quad (4.44)$$

Si recordamos que el hamiltoniano para un potencial de oscilador armónico tiene la forma:

$$H_{osc} = \frac{1}{2} [p^2 + r^2] k u \quad (4.45)$$

es fácil ver que

$$\frac{1}{2} (p^2 + r^2) |n\ell\rangle = (2n + \ell + 3/2) |n\ell\rangle \quad (4.46)$$

además, como sabemos que

$$r^2 |n\ell\rangle = (2n + \ell + 3/2) |n\ell\rangle - \sqrt{(n+1)(n+\ell+3/2)} |n+1\ell\rangle - \sqrt{n(n+\ell+1/2)} |n-1\ell\rangle \quad (4.47)$$

Obtendremos

$$p^2 |n\ell\rangle = (2n + \ell + 3/2) |n\ell\rangle + \sqrt{(n+1)(n+\ell+3/2)} |n+1\ell\rangle + \sqrt{n(n+\ell+1/2)} |n-1\ell\rangle \quad (4.48)$$

Veamos ahora cual es el efecto del operador $r \frac{\partial}{\partial r}$ sobre las funciones de oscilador, para lo cual usaremos la forma para $|n\ell\rangle$ dada en la referencia (10). Así tenemos

$$|n\ell\rangle = A_{n\ell} (\vec{\eta} \cdot \vec{\eta})^n Y_{\ell m}(\vec{\eta}) |0\rangle \quad (4.49)$$

en donde

$$A_{n\ell} = (-1)^n \sqrt{\frac{4\pi}{(2n)!! (2n+2\ell+1)!!}}$$

$$\vec{\eta} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\vec{r} - i\vec{p}) \quad (4.50)$$

$$Y_{\ell m}(\vec{\eta}) = \eta^\ell Y_\ell^m(\theta, \varphi)$$

Haciendo uso de la definición de $\vec{\eta}$ tenemos:

$$\vec{\eta} \cdot \vec{\eta} = \frac{1}{2} (r^2 - p^2 - i \vec{p} \cdot \vec{r} - i \vec{r} \cdot \vec{p}) \quad (4.51)$$

y usando el hecho de que

$$i \vec{p} \cdot \vec{r} = i \vec{r} \cdot \vec{p} + 3 \quad (4.52)$$

se obtiene

$$\vec{\eta} \cdot \vec{\eta} = \frac{1}{2} (r^2 - p^2 - 3) - i \vec{r} \cdot \vec{p} \quad (4.53)$$

Si ahora recordamos que

$$i \vec{r} \cdot \vec{p} = i r \hat{r} \cdot \frac{1}{i} \nabla = r \frac{\partial}{\partial r} \quad (4.54)$$

vemos que el operador $r \frac{\partial}{\partial r}$ se puede expresar en función del operador de creación $\vec{\eta}$ en la forma,

$$r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{2} (r^2 - p^2 - 3) - \vec{\eta} \cdot \vec{\eta} \quad (4.55)$$

Obtenemos así,

$$\begin{aligned} r \frac{\partial}{\partial r} |n\rangle &= \left[\frac{1}{2} (r^2 + p^2) - \frac{3}{2} \right] |n\rangle - p^2 |n\rangle - \\ &\quad - \vec{\eta} \cdot \vec{\eta} |n\rangle \end{aligned} \quad (4.56)$$

Usando las expresiones (4.46) a (4.50) obtenemos:

$$r \frac{\partial}{\partial r} |n\ell\rangle = -\frac{3}{2} |n\ell\rangle + \sqrt{(n+1)(n+\ell+3/2)} |n+1\ell\rangle - \sqrt{n(n+\ell+1/2)} |n-1\ell\rangle \quad (4.57)$$

Veamos ahora cual es el efecto del operador p^2 sobre las funciones de onda del oscilador armónico multiplicadas por una función de r o sea:

$$p^2 F(r) |n\ell\rangle = -\nabla \cdot \nabla (F(r) |n\ell\rangle) = -\nabla \cdot (F(r) \nabla |n\ell\rangle) + |n\ell\rangle \nabla^2 F(r) \quad (4.58)$$

Aplicando el operador nabra, tenemos

$$p^2 F(r) |n\ell\rangle = F(r) p^2 |n\ell\rangle - 2 \nabla F(r) \cdot \nabla |n\ell\rangle + |n\ell\rangle p^2 F(r) \quad (4.59)$$

Si $F(r)$ es el factor de correlación dado en (4.39), entonces tenemos:

$$p^2 F(r) = 2bs \exp(-sr^2) (2sr^2 - 3) \quad (4.60)$$

así como

$$\nabla F(r) \cdot \nabla |n\ell\rangle = 2bs \exp(-sr^2) r \frac{\partial}{\partial r} |n\ell\rangle \quad (4.61)$$

Si hacemos ahora uso de las expresiones (4.48), (4.57), (4.59) a (4.61) se obtiene

$$\begin{aligned}
 p^2 F(r|nl\rangle = & (2n+l+3/2) |nl\rangle + \sqrt{(n+1)(n+l+3/2)} |n+1l\rangle + \\
 & + \sqrt{n(n+l+1/2)} |n-1l\rangle + b \exp(-sr^2) \left\{ [4sr^2 - \right. \\
 & - (2n+l+3/2)] |nl\rangle - \sqrt{(n+1)(n+l+3/2)} (1+4s) |n+1l\rangle + \\
 & \left. + \sqrt{n(n+l+1/2)} (4s-1) |n-1l\rangle \right\} \quad (4.62)
 \end{aligned}$$

Multiplicando la expresión anterior por el bra $\langle n'l|F(r)$ se tiene finalmente:

$$\begin{aligned}
 \langle n'l|F(r) p^2 F(r)|nl\rangle = & (2n+l+3/2) \delta_{n'n} + \sqrt{(n+1)(n+l+3/2)} \delta_{n'n+1} \\
 & + \sqrt{n(n+l+1/2)} \delta_{n',n-1} - b(4n+2l+3) \langle n'l|\exp(-sr^2)|nl\rangle - \\
 & - 2b(1+2s) \sqrt{(n+1)(n+l+3/2)} \langle n'l|\exp(-sr^2)|n+1l\rangle + \\
 & + 2b(2s-1) \sqrt{n(n+l+1/2)} \langle n'l|\exp(-sr^2)|n-1l\rangle + b^2(2n+l+3/2) \times \\
 & \times \langle n'l|\exp(-2sr^2)|nl\rangle + b^2(1+4s) \sqrt{(n+1)(n+l+3/2)} \langle n'l|\exp(-2sr^2)|n+1l\rangle \\
 & + b^2(1-4s) \sqrt{n(n+l+1/2)} \langle n'l|\exp(-2sr^2)|n-1l\rangle + \\
 & + 4sb \langle n'l|r^2 \exp(-sr^2)|nl\rangle - 4sb^2 \langle n'l|r^2 \exp(-2sr^2)|nl\rangle \quad (4.63)
 \end{aligned}$$

Para expresar este elemento de matriz en función de las integrales de Tal mi usaremos los siguientes resultados:

$$\langle n'l | \exp(-sr^2) | nl \rangle = \sum_{p=l}^{l+n'+n} B(n', l, n, l, p) \frac{1}{(1+s)^{p+3/2}}$$

$$\langle n'l | r^2 \exp(-sr^2) | nl \rangle = \sum_{p=l}^{l+n'+n} B(n', l, n, l, p) \frac{p+3/2}{(1+s)^{p+5/2}}$$

$$\begin{aligned} B(n', l, n, l, n+n'+l+1) &= B(n', l, n-1, l, n+n'+l) = \\ &= B(n', l, n-1, l, n+n'+l+1) = 0 \end{aligned} \quad (4.64)$$

Por lo que nuestro elemento de matriz toma la forma:

$$\begin{aligned} \langle n'l | F(r) \cdot p^2 F(r) | nl \rangle &= (2n+l+3/2) \delta_{n',n} + \sqrt{n(n+l+1/2)} \delta_{n',n-1} \\ &+ \sqrt{(n+1)(n+l+3/2)} \delta_{n',n+1} + \sum_{p=l}^{l+n+n'+1} \left\{ \left[\left(\alpha_1 + \frac{\delta_1(p+3/2)}{1+s} \right) B(n', l, n, l, p) + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \beta_1 B(n', l, n-1, l, p) + \gamma_1 B(n', l, n+1, l, p) \right] \frac{1}{(1+s)^{p+3/2}} + \right. \\ &+ \left. \left[\left(\alpha_2 + \frac{\delta_2(p+3/2)}{(1+2s)} \right) B(n', l, n, l, p) + \beta_2 B(n', l, n-1, l, p) + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \gamma_2 B(n', l, n+1, l, p) \right] \frac{1}{(1+2s)^{p+3/2}} \right\} \end{aligned} \quad (4.65)$$

en donde hemos definido

$$\alpha_1 = -b(4n + 2l + 3)$$

$$\alpha_2 = b^2(2n + l + 3/2)$$

$$\beta_1 = -2b(1-2s)\sqrt{(n+1)(n+l+3/2)}$$

$$\beta_2 = b^2(1-4s)\sqrt{n(n+l+1/2)}$$

$$\gamma_1 = -2b(1+2s)\sqrt{(n+1)(n+l+3/2)}$$

$$\gamma_2 = b^2(1+4s)\sqrt{(n+1)(n+l+3/2)}$$

$$\delta_1 = 4s^2b$$

$$\delta_2 = -4s^2b^2 \quad (4.66)$$

Debido a que trabajaremos con un hamiltoniano adimensional, calcularemos los elementos de matriz

$$\langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \ell | | n(\beta) \ell(\beta) | | \rangle_c \quad (4.67)$$

con

$$\ell = \frac{J}{mc^2} = \frac{1}{2} \in p^2 \quad (4.68)$$

y el elemento de matriz de energía cinética calculado en la base correlacionada es

$$\langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | \ell | | n(\beta) \ell(\beta) | | \rangle_c = \frac{1}{2} \in \langle n(\alpha) \ell(\alpha) | | p^2 | | n(\beta) \ell(\beta) | | \rangle_c \quad (4.69)$$

Aplicando la definición de las funciones correlacionadas se tiene:

$$\langle n(\alpha) l(\alpha) m_l | \pm | n(\beta) l(\beta) m_l \rangle_c =$$

$$= \frac{1}{2} \epsilon \frac{\langle n(\alpha) l(\alpha) m_l | F p^2 F | n(\beta) l(\beta) m_l \rangle}{\sqrt{\langle n(\alpha) l(\alpha) m_l | F^2 | n(\alpha) l(\alpha) m_l \rangle \langle n(\beta) l(\beta) m_l | F^2 | n(\beta) l(\beta) m_l \rangle}}$$

y recordando la definición del ket $| n l s j \rangle$

$$| n l s j \rangle = \sum_{m_s} \langle l s m_j - m_s m_s | j m_j \rangle | n l \rangle \chi_s^{m_s} \quad (4.70)$$

tenemos:

$$\langle n' l' s_j | F p^2 F | n l s_j \rangle =$$

$$= \sum_{m_s, m_s'} \langle l' s m_j - m_s' m_s' | j m_j \rangle \langle l s m_j - m_s m_s | j m_j \rangle \langle n' l' | F p^2 F | n l \rangle \delta_{m_s m_s'}$$

Como

$$\langle n' l' | F p^2 F | n l \rangle = \langle n' l' | F p^2 F | n l \rangle \delta_{l, l'}$$

se tiene:

$$\langle n' l' s_j | F p^2 F | n l s_j \rangle = \langle n' l' | F p^2 F | n l \rangle \delta_{l, l'} \quad (4.71)$$

Usando ahora este resultado y notando que

$$\langle n l s_j | F^2 | n l s_j \rangle = \langle n l | F^2 | n l \rangle \quad (4.72)$$

se obtiene el elemento de matriz de la energía cinética en la base correlacionada:

$$\begin{aligned} & \langle n(\alpha) l(\alpha) || t || n(\beta) l(\beta) \rangle_c = \\ & = \frac{1}{2} \epsilon \frac{\langle n(\alpha) l(\alpha) | F p^2 F | n(\beta) l(\beta) \rangle \delta_{l(\alpha), l(\beta)}}{\sqrt{(n(\alpha) l(\alpha) | F^2 | n(\alpha) l(\alpha)) (n(\beta) l(\beta) | F^2 | n(\beta) l(\beta))}} \end{aligned} \quad (4.73)$$

Esta expresión y las ecuaciones (4.41) y (4.65) nos permiten evaluar los elementos de matriz de la energía cinética en la base correlacionada.

4.5 Elementos de matriz del hamiltoniano en la base correlacionada.

Trabajaremos con un hamiltoniano adimensional definido por

$$h = t + \psi(r_{12}) \quad (4.74)$$

en donde

$$\begin{aligned} t &= \frac{1}{2} \epsilon p^2 \\ \psi(r_{12}) &= \frac{1}{mc^2} \sum_{\lambda} v_{\lambda}(r) \hat{Q}_{\lambda} = \sum_{\lambda} \psi_{\lambda}(r) \hat{Q}_{\lambda} \end{aligned} \quad (4.75)$$

en donde la parte radial del potencial tiene la forma:

$$\psi_{\lambda}(r) = \sum_{q=1}^Q \frac{v_{q\lambda}}{mc^2} \exp(-2\alpha_{q\lambda} r^2/\epsilon) \quad (4.76)$$

con

$$\alpha_{q\lambda} = \frac{\hbar^2}{m mc^2} \eta_{q\lambda}^2$$

Estamos interesados en evaluar los elementos de matriz del hamiltoniano en la base correlacionada, para lo cual solo tenemos que evaluar los elementos de matriz del potencial en esta base, ya que tenemos evaluados los de la energía cinética en la sección anterior. Recordando la definición de las funciones correlacionadas y teniendo en cuenta la expresión (4.75) para el potencial tenemos:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) ||| \hat{V} ||| n(\beta) \ell(\beta) \rangle_c &= \\ &= \frac{\sum_{\lambda} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) ||| F \hat{\Phi}_{\lambda} \hat{\Psi}_{\lambda} F ||| n(\beta) \ell(\beta) \rangle}{\sqrt{(n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2 | n(\alpha) \ell(\alpha)) (n(\beta) \ell(\beta) | F^2 | n(\beta) \ell(\beta))}} \end{aligned} \quad (4.77)$$

Los elementos del numerador pueden separarse en la integral radial por un lado y la angular por otro, o sea:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) ||| F \hat{\Phi}_{\lambda} \hat{\Psi}_{\lambda} F ||| n(\beta) \ell(\beta) \rangle &= \\ &= (n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2 \hat{\Psi}_{\lambda} | n(\beta) \ell(\beta)) \langle \ell(\alpha) ||| \hat{\Phi}_{\lambda} ||| \ell(\beta) \rangle \end{aligned} \quad (4.78)$$

Si calculamos las integrales angulares y usamos (4.77), obtenemos la siguiente expresión para los elementos de matriz del potencial

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) \ell(\alpha) ||| \hat{V} ||| n(\beta) \ell(\beta) \rangle_c &= \\ &= \frac{1}{\sqrt{(n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2 | n(\alpha) \ell(\alpha)) (n(\beta) \ell(\beta) | F^2 | n(\beta) \ell(\beta))}} \times \\ &\times \left\{ (n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2 \hat{\Psi}_c | n(\beta) \ell(\beta)) - \frac{1}{2} \ell(\beta) (\ell(\beta) + 1) (n(\alpha) \ell(\alpha) | F^2 \hat{\Psi}_{LS} | n(\beta) \ell(\beta)) + \right. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & W_{l(\alpha), l(\beta)} (n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \mathcal{V}_{W_{12}} | n(\beta) l(\beta) \rangle + l(\beta) (l(\beta) + 1) \times \\
 & \times (n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \mathcal{V}_{12} | n(\beta) l(\beta) \rangle + S_{l(\alpha), l(\beta), 1} (n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \mathcal{V}_T | n(\beta) l(\beta) \rangle) S_{l(\alpha), l(\beta)} + \\
 & + S_{l(\alpha), l(\beta) \pm 2, 1} (n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \mathcal{V}_T | n(\beta) l(\beta) \rangle S_{l(\alpha), l(\beta) \pm 2}) \}
 \end{aligned}
 \tag{4.79}$$

en donde los coeficientes $W_{l(\alpha), l(\beta)}$, $S_{l(\alpha), l(\beta), 1}$, $S_{l(\alpha), l(\beta) \pm 2, 1}$ fueron definidos en el capítulo 2.

La expresión (4.79) nos da el elemento de matriz del potencial en las bases correlacionadas, en función de las integrales radiales

$(n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \mathcal{V}_\lambda | n(\beta) l(\beta) \rangle$ que, para el factor de correlación que estamos usando, toman la siguiente forma:

$$\begin{aligned}
 (n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \mathcal{V}_\lambda | n(\beta) l(\beta) \rangle &= (n(\alpha) l(\alpha) | \mathcal{V}_\lambda | n(\beta) l(\beta) \rangle - \\
 &- 2b (n(\alpha) l(\alpha) | \exp(-sr^2) \mathcal{V}_\lambda | n(\beta) l(\beta) \rangle + b^2 (n(\alpha) l(\alpha) | \exp(-2sr^2) \mathcal{V}_\lambda | n(\beta) l(\beta) \rangle)
 \end{aligned}
 \tag{4.80}$$

Si ahora expresamos los elementos de matriz de la derecha en función de las integrales de Talmi de orden p , o sea haciendo uso de las relaciones

$$\begin{aligned}
 (n' l' | g(r) | n l) &= \sum_{p=\frac{1}{2}(l+l')}^{\frac{1}{2}(l+l') + n + n'} B(n', l', n, l, p) I_p
 \end{aligned}
 \tag{4.81}$$

$$y \quad I_p = \frac{2}{\Gamma(p+3/2)} \int_0^\infty r^{2p+2} \exp(-r^2) g(r) dr$$

es fácil ver que nuestro elemento de matriz toma la forma:

$$\begin{aligned} \langle n(\alpha) l(\alpha) | F^2 \hat{O}_\lambda | n(\beta) l(\beta) \rangle &= \sum_{p=\frac{1}{2}(l(\alpha)+l(\beta))}^{\frac{1}{2}(l(\alpha)+l(\beta))+n(\alpha)+n(\beta)} B(n(\alpha), l(\alpha), n(\beta), l(\beta), p) \times \\ &\times \sum_{q=1}^6 A_{q\lambda} \left[\frac{1}{(1+2d_{q\lambda}/\epsilon)^{p+3/2}} - \frac{2b}{(1+5+2d_{q\lambda}/\epsilon)^{p+3/2}} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{b^2}{(1+25+2d_{q\lambda}/\epsilon)^{p+3/2}} \right] \end{aligned} \quad (4.82)$$

en donde hemos definido

$$A_{q\lambda} = \frac{\gamma_{q\lambda}}{mc^2}$$

La expresión anterior nos permite calcular los elementos de matriz en función de los coeficientes $B(n', l', n, l, p)$, los parámetros del potencial, epsilon y los parámetros de correlación.

Los elementos de matriz del hamiltoniano son ahora fácilmente evaluables, usando la expresión (4.73) que nos da los elementos de matriz de la energía cinética en la nueva base, las expresiones (4.79) y (4.82) nos permiten calcular los de la energía potencial. Daremos explícitamente los elementos de matriz del hamiltoniano en la base correlacionada para los tres casos que necesitamos:

a) Primer caso $l(\alpha) = l(\beta) = 0, n(\alpha) = n', n(\beta) = n$

$$\langle n' 0 | | h | | n 0 \rangle_c = \frac{\langle n' 0 | T | n 0 \rangle + \langle n' 0 | F^2 \hat{O}_c | n 0 \rangle}{\sqrt{\langle n' 0 | F^2 | n' 0 \rangle \langle n 0 | F^2 | n 0 \rangle}} \quad (4.83)$$

b) Para $l(\alpha) = l(\beta) = 2$ y $n(\alpha) = n'$, $n(\beta) = n$

$$\begin{aligned} \langle n'211 | h | n211 \rangle_c &= \frac{1}{\sqrt{(n'21F^2|n'2)(n21F^2|n2)}} \times \\ &\times \left[\langle n'211 | n2 \rangle + (n'21F^2 \mathcal{O}_c | n2) - 3(n'21F^2 \mathcal{O}_{L3} | n2) + \right. \\ &\left. + 7(n'21F^2 \mathcal{O}_{W12} | n2) + 6(n'21F^2 \mathcal{O}_{L2} | n2) - 2(n'21F^2 \mathcal{O}_T | n2) \right] \end{aligned} \quad (4.84)$$

c) Para $l(\alpha) \neq l(\beta)$, $n(\alpha) = n'$, $n(\beta) = n$

$$\begin{aligned} \langle n'211 | h | n011 \rangle_c &= \langle n011 | h | n'211 \rangle_c = \\ &= \frac{\sqrt{8} (n'21F^2 \mathcal{O}_T | n0)}{\sqrt{(n'21F^2|n'2)(n01F^2|n0)}} \end{aligned} \quad (4.85)$$

4.6 Momento Cuadrupolar y valor esperado de r'^2

En esta sección deduciremos las expresiones del momento cuadrupolar eléctrico y el valor esperado de r'^2 en función del número de cuantos, la frecuencia del oscilador y el eigenvector correspondiente a la energía mínima calculada en la base correlacionada y ortonormalizada.

La función de onda de prueba propuesta fué:

$$\psi = \sum_q a_q |n(q)l(q)11\rangle_c \quad (4.86)$$

Pero para conocer los coeficientes a_q se tendría que hacer una diagonalización simultánea de las matrices h y η , este proceso debido a

su complejidad fué evitado, por lo que preferimos usar una transformación de Löwdin, para pasar a una nueva base correlacionada, pero la cual ya es ortonormal; como hemos visto esta transformación tiene la siguiente forma:

$$\textcircled{+} = \psi \eta^{-1/2} \quad (4.87)$$

en donde el vector ψ viene dado por

$$\psi = (\psi_S, \psi_D)$$

$$\psi_S = (|0011\rangle_c, |1011\rangle_c, \dots, |N/2 \ 0 \ 11\rangle_c) \quad (4.88)$$

$$\psi_D = (|0211\rangle_c, |1211\rangle_c, \dots, |N/2-1 \ 2 \ 11\rangle_c)$$

y recordando que para obtener $\eta^{-1/2}$ se usa la expansión binomial dada en la sección (4.2), es fácil ver que esta matriz tiene la forma

$$\eta^{-1/2} = \begin{pmatrix} \eta_S^{-1/2} & 0 \\ 0 & \eta_D^{-1/2} \end{pmatrix} \quad (4.89)$$

donde las matrices η_S y η_D están definidas como aquellas que tienen elementos de la forma:

$$\eta_{S \ n n'} = \langle n' 0 11 | n 0 11 \rangle_c \quad (4.90)$$

$$\eta_{D \ n n'} = \langle n' 2 11 | n 2 11 \rangle_c$$

las cuales tienen dimensiones $(N/2+1) \times (N/2+1)$ y $(N/2) \times (N/2)$ respectivamente, siendo el número de

cuantos denotado por N .

Entonces la transformación de Löwdin toma la forma:

$$\textcircled{H} = (\psi_S, \psi_D) \begin{pmatrix} \eta_S^{-1/2} & 0 \\ 0 & \eta_D^{-1/2} \end{pmatrix} = (\psi_S \eta_S^{-1/2}, \psi_D \eta_D^{-1/2}) \quad (4.91)$$

Por lo que podemos expresar el vector \textcircled{H} como:

$$\textcircled{H} = (\textcircled{H}_S, \textcircled{H}_D) \quad (4.92)$$

definiendo los vectores \textcircled{H}_S y \textcircled{H}_D como:

$$\textcircled{H}_S = \psi_S (\eta_S)^{-1/2} \quad (4.93)$$

$$\textcircled{H}_D = \psi_D (\eta_D)^{-1/2}$$

De la definición del vector ψ_S y ψ_D , así como la del ket $|nl\rangle_c$ es fácil ver que

$$\psi_S = (|100\rangle_c, |110\rangle_c, \dots, |N/2 0\rangle_c) \begin{matrix} \psi' \\ \psi' \\ \psi' \\ \psi' \end{matrix} \quad (4.94)$$

$$\psi_D = (|102\rangle_c, |112\rangle_c, \dots, |N/2-1 2\rangle_c) \begin{matrix} \psi' \\ \psi' \\ \psi' \\ \psi' \end{matrix}$$

donde hemos definido el ket $|nl\rangle_c$ de la siguiente manera:

$$|nl\rangle_c = \frac{F(r) |nl\rangle}{\sqrt{\langle nl | F^2 | nl \rangle}} \quad (4.95)$$

De lo anterior, vemos que podemos expresar la función de onda en término de la base correlacionada y ortonormalizada de la siguiente manera :

$$\psi = \sum_{n=0}^{N/2} S C_n \oplus S_n + \sum_{n=0}^{N/2-1} S D_n \oplus D_n \quad (4.96)$$

y usando la expresión (4.93) tenemos :

$$\begin{aligned} \oplus S_n &= \sum_{k=0}^{N/2} (\psi_S)_k (\eta_S^{-1/2})_{kn} = \sum_{k=0}^{N/2} |k0\rangle_c (\eta_S^{-1/2})_{kn} \psi_{011}^1 \\ \oplus D_n &= \sum_{k=0}^{N/2-1} (\psi_D)_k (\eta_D^{-1/2})_{kn} = \sum_{k=0}^{N/2-1} |k2\rangle_c (\eta_D^{-1/2})_{kn} \psi_{211}^1 \end{aligned} \quad (4.97)$$

e insertando estos resultados en (4.96) tenemos :

$$\begin{aligned} \psi &= \sum_{n=0}^{N/2} \sum_{k=0}^{N/2} S C_n (\eta_S^{-1/2})_{kn} |k0\rangle_c \psi_{011}^1 + \\ &+ \sum_{n=0}^{N/2-1} \sum_{k=0}^{N/2-1} S D_n (\eta_D^{-1/2})_{kn} |k2\rangle_c \psi_{211}^1 \end{aligned} \quad (4.98)$$

Esta expresión nos permite expresar las funciones radiales como :

$$\begin{aligned} \psi_S(r) &= \sum_{n,k=0}^{N/2} S C_n (\eta_S^{-1/2})_{kn} |k0\rangle_c \\ \psi_D(r) &= \sum_{n,k=0}^{N/2-1} S D_n (\eta_D^{-1/2})_{kn} |k2\rangle_c \end{aligned} \quad (4.99)$$

En el capítulo 2 vimos que para calcular \bar{Q} y $\langle r^2 \rangle$ se necesitaban evaluar las integrales radiales $(\psi_S | r^2 | \psi_S)$, $(\psi_D | r^2 | \psi_D)$ y $(\psi_S | r^2 | \psi_D)$, las cuales usando las ecuaciones (4.95) y (4.99) tienen la siguiente expresi-

sión:

$$(\varphi_S | r^2 | \varphi_S) =$$

$$= \sum_{\substack{n, n'=0 \\ k, k'=0}}^{N/2} \frac{S_{Cn} S_{Cn'} (\eta_S^{-1/2})_{kn} (\eta_S^{-1/2})_{k'n'} (K_0 | F^2 r^2 | K'_0)}{\sqrt{(K_0 | F^2 | K_0) (K'_0 | F^2 | K'_0)}} \quad (4.100)$$

$$(\varphi_S | r^2 | \varphi_D) =$$

$$= \sum_{n, k=0}^{N/2} \sum_{n', k'=0}^{N/2-1} \frac{S_{Cn} S_{Dn'} (\eta_S^{-1/2})_{kn} (\eta_D^{-1/2})_{k'n'} (K_0 | F^2 r^2 | K'_2)}{\sqrt{(K_0 | F^2 | K_0) (K'_2 | F^2 | K'_2)}} \quad (4.101)$$

$$(\varphi_D | r^2 | \varphi_D) =$$

$$= \sum_{\substack{n, n'=0 \\ k, k'=0}}^{N/2-1} \frac{S_{Dn} S_{Dn'} (\eta_D^{-1/2})_{kn} (\eta_D^{-1/2})_{k'n'} (K_2 | F^2 r^2 | K'_2)}{\sqrt{(K_2 | F^2 | K_2) (K'_2 | F^2 | K'_2)}} \quad (4.102)$$

Calcularemos ahora los elementos de matriz $(n' l' | F^2 r^2 | n l)$,

para un factor de correlación de la forma:

$$F(r) = 1 - b \exp(-sr^2) \quad (4.103)$$

de donde es inmediato que

$$\begin{aligned} (n' l' | F^2 r^2 | n l) &= (n' l' | r^2 | n l) - 2b (n' l' | \exp(-sr^2) r^2 | n l) + \\ &+ b^2 (n' l' | \exp(-2sr^2) r^2 | n l). \end{aligned} \quad (4.104)$$

Calculando estos elementos de matriz se obtiene:

$$\begin{aligned}
 \langle n' \ell' | F^2 r^2 | n \ell \rangle = & \delta_{\ell \ell'} \left[-\sqrt{n'(n'+\ell'+1/2)} \delta_{n, n'-1} + \right. \\
 & \left. + (2n'+\ell'+3/2) \delta_{n, n'} - \sqrt{(n'+1)(n'+\ell'+3/2)} \delta_{n, n'+1} \right] + \\
 & \frac{1}{2}(\ell+\ell')+n+n' \\
 & + b \sum_{p=\frac{1}{2}(\ell+\ell')} B(n', \ell', n, \ell, p) \left\{ \frac{-2(p+3/2)}{(1+s)^{p+5/2}} + \frac{b(p+3/2)}{(1+2s)^{p+5/2}} \right\} \quad (4.105)
 \end{aligned}$$

y recordando que

$$Q = \frac{e\hbar}{\mu\omega} \frac{1}{10} \left\{ \sqrt{2} (\psi_S | r^2 | \psi_D) - \frac{1}{2} (\psi_D | r^2 | \psi_D) \right\} \quad (4.107)$$

$$\langle r'^2 \rangle = \frac{\hbar}{\mu\omega} \left[(\psi_S | r^2 | \psi_S) + (\psi_D | r^2 | \psi_D) \right] \quad (4.107)$$

vemos que tenemos todos los elementos necesarios para calcular Q y $\langle r'^2 \rangle$

En el siguiente capítulo se muestran los resultados obtenidos para la energía, cuando se usa la técnica de funciones correlacionadas.

CAPITULO V

5.1 Proceso de Cálculo.

Para el cálculo con funciones de onda correlacionadas, se fijó el número de cuantos y se calculó la matriz η , cuyos elementos son $\eta_{n\alpha} = \langle \alpha | a^n | \alpha \rangle$, dados en forma explícita en el capítulo anterior. Se calculó la matriz de la energía cinética, así como la de energía potencial, en la base correlacionada no ortogonal. El siguiente paso consistió en usar la transformación de Löwdin, la cual nos permitió pasar a la base correlacionada y ortonormalizada; para esto se obtuvo la matriz $\eta^{-1/2}$, usando el desarrollo binomial. Así pasamos de la representación del hamiltoniano en la base no-ortogonal a la base ortogonal, por la transformación

$$A = \eta^{-1/2} h \eta^{-1/2} \quad (5.1)$$

Se diagonalizó la matriz A , encontrándose de esta forma el eigenvalor mínimo y su eigenvector respectivo, el cual nos proporciona los coeficientes SC_n y SD_n mencionados en el capítulo anterior.

El análisis variacional se llevó a cabo variando tres parámetros independientes, los cuales son: ϵ , que es esencialmente la frecuencia del oscilador, así como los parámetros de correlación a y b . Se hizo el cálculo a cuatro cuantos, fijando inicialmente el valor de ϵ y variando los parámetros a y b , hasta obtener un par de valores de ellos, que nos dieran un valor de la energía cercano a un mínimo relativo. Con este par de valores, se procedió a obtener la energía como función de la frecuencia del oscilador.

En los cálculos para ocho y doce cuantos, se supuso que los parámetros de correlación no dependían fuertemente del número de cuantos de la aproximación; razón por la que sólo analizamos regiones cercanas a los valores obtenidos para a y b a cuatro cuantos, buscando aquellos valores que nos diera un mínimo en la energía para estos números de cuantos; obtenidos estos se vió la forma como la energía depende la frecuencia.

Como se ve, el problema variacional usando funciones correlacionadas, es bastante complejo, ya que los valores para la energía del estado base dependen del número de cuantos, la frecuencia del oscilador, así como de los parámetros de correlación, los cuales es de suponerse que dependen de la frecuencia y del número de cuantos; la primera dependencia fue ignorada en este trabajo.

5.2 Resultados.

En nuestros cálculos usamos funciones de onda correlacionada de la forma:

$$\langle n | s_j \rangle_c = \frac{F(r) \langle n | s_j \rangle}{\sqrt{\langle n | s_j | F^2(r) | n | s_j \rangle}} \quad (5.2)$$

con un factor de correlación

$$F(r_{12}) = 1 - b \exp(-a r_{12}^2) \quad (5.3)$$

donde a y b son los parámetros de correlación, con a dada en fm^{-2} , en tanto que b es adimensional.

Los potenciales que se estudiaron fueron T_1 , T_2 y E , comparándose los resultados obtenidos en la base correlacionada (B.C.) con los obtenidos al usar la base no correlacionada del oscilador (B.O.).

Denotaremos por $E_{N/2}(p, q)$ la curva de nivel de la energía, para un número de cuantos N , usando el potencial p y en la cual se está variando q que puede ser igual a cualquiera de los parámetros -- a , b ó E , manteniéndose fijos los restantes.

En el cálculo de la energía a cuatro cuantos, se obtiene que todas las curvas $E_2(p, b)$ alcanzan un mínimo para valores de $b < 1$, que se encuentra debajo del valor que se obtiene con la B.O. ($a=0$), para todos los potenciales usados.

Para $b \approx 1$ las curvas $E_2(p, b)$ se encuentran arriba de la energía calculada con la B.O. en los potenciales T_2 y E mientras que para el potencial T_1 , el valor óptimo de la energía se alcanza para $b \approx 1$. Sólo mostramos (Fig. 5.1) las curvas $E_2(E, b)$, ya que para los poten-

ciales restantes se obtiene un comportamiento cualitativamente similar.

De las curvas $E_2(p, a)$ vemos que para $a < 1 \text{ fm}^{-2}$ la energía calculada con la B.C. es mayor que con la B.O. ($b=0$), notándose además que cuando $b \rightarrow 1$ esta separación se hace mayor.

Para $a > 1 \text{ fm}^{-2}$, $E_2(p, a)$ decrece rápidamente hasta alcanzar un mínimo después del cual la energía es poco sensible al incremento de a (Fig. 5.2).

También mostramos los resultados obtenidos para valores muy pequeños de a (Fig. 5.3), usando el potencial T2, en donde se observa que para $b=1$, la curva $E_2(\tau_2, a)$ se aleja de la energía calculada con la B.O. cuando $a \rightarrow 0$, la cual se debe a que en este caso $F(\tau)$ tiende a cero y nuestra base de funciones correlacionadas queda indeterminada.

Para ocho y doce cuantos, se observa que para pequeños valores de a ($a < 1 \text{ fm}^{-2}$), las curvas $E_4(p, a)$ y $E_6(p, a)$ están arriba del valor obtenido usando la B.O., como se ve para el potencial T2. (Fig. 5.4). Para los potenciales E y T1 se encontró un comportamiento cualitativamente similar.

De estos resultados vemos que, para $a < 1 \text{ fm}^{-2}$, no es conveniente usar la técnica de correlaciones, en tanto que para valores de mayores que 1 fm^{-2} , esta técnica nos permite mejorar notablemente nuestros resultados.

El comportamiento de las curvas $E_4(p, b)$ y $E_6(p, b)$ es similar al descrito para $E_2(p, b)$; se encuentra que para el potencial E las curvas $E_4(E, b)$ y $E_6(E, b)$ están muy cerca

nas entre sí (Fig. 5.5).

En la Tabla III se muestran los valores óptimos de los parámetros de correlación a cuatro, ocho y doce cuantos para los potenciales usados.

Las curvas $E_{N/2}(p, \epsilon)$ se obtuvieron usando estos valores para los parámetros de correlación, excepto en el cálculo a ocho cuantos, en donde se usaron los valores óptimos obtenidos para doce cuantos.

Para los potenciales T1 y T2 a cuatro cuantos (Fig. 5.6), se encontró que aún y cuando el uso de la B.C. no predice un estado ligado, si se logra una gran mejoría con respecto a los resultados que se obtienen cuando se usa la B.O., siendo éste mas notorio para el potencial T1. Los resultados para ocho cuantos muestran como el uso de la B.C. nos permite predecir un estado débilmente ligado en ambos potenciales, para un valor de ϵ menor que el predicho por el cálculo con la B.O. (Fig. 5.7). En los resultados para doce cuantos notamos que la mejoría es menor que la lograda en los casos anteriores, siendo el potencial T1 el más sensible al uso de la B.C., pero para ambos potenciales las curvas de energía obtenidas usando la B.C., están siempre por debajo de las correspondientes a la B.O. (Fig. 5.8); además, el mínimo se logra para valores más pequeños de ϵ en las curvas calculadas con la B.C.

Los resultados más halagadores se obtuvieron para el potencial E , ya que a cuatro cuantos se obtiene un mínimo de la energía correlacionada igual a $E = -1.8$ MeV, en tanto que usando la B.O. se tiene un valor mínimo de $E = -1.25$ MeV (Fig. 5.9). Para ocho y doce cuantos -

las curvas correspondientes a las B.C. (Fig. 5.10), alcanzan su mínimo a un valor muy cercano al valor experimental (-2.22 MeV), y en este potencial la ϵ para la cual se alcanza el mínimo en las curvas correlacionadas es mayor que la correspondiente a la B.O.

5.3 Potencial Efectivo.

Como hemos visto usar una base de funciones correlacionadas, complica el problema matemáticamente. Es por esta razón que nos hacemos la siguiente pregunta:

¿No sería posible obtener los mismos resultados logrados en la B.C. usando, en vez de un potencial fenomenológico V_{fen} , un potencial "efectivo", de la forma $V_{eff} = [1 - \beta \exp(-\alpha r_{12}^2)] V_{fen}$, pero usando la B.O.? O, en otras palabras, nos preguntamos si la efectivización lograda usando la B.C., es equivalente a tener un hamiltoniano "efectivo" de la forma:

$$H_{eff} = T + V_{eff} \quad (5.4)$$

Para encontrar la respuesta a la pregunta anterior, procedimos a buscar la pareja de valores α y β , para los cuales ambos métodos dieran los mismos resultados.

Como

$$H_{eff} = T + [1 - \beta \exp(-\alpha r_{12}^2)] V_{fen}. \quad (5.5)$$

se puede encontrar fácilmente la matriz H_{eff} ; siendo sus elementos de matriz :

$$\begin{aligned} \langle n'011 | H_{eff} | n011 \rangle = & \frac{e}{2} \left[(2n+3/2) \delta_{n,n'} + \sqrt{(n+1)(n+3/2)} \delta_{n+1,n'} + \right. \\ & \left. + \sqrt{n(n+1/2)} \delta_{n-1,n'} \right] + \langle n'01 | \psi_c^{eff} | n0 \rangle \end{aligned} \quad (5.6)$$

$$\begin{aligned} \langle n'211 | H_{eff} | n211 \rangle = & \frac{e}{2} \left[(2n+7/2) \delta_{n,n'} + \sqrt{(n+1)(n+7/2)} \delta_{n+1,n'} + \right. \\ & \left. + \sqrt{n(n+5/2)} \delta_{n-1,n'} \right] + \langle n'21 | \psi_c^{eff} | n2 \rangle - 3 \langle n'21 | \psi_{2S}^{eff} | n2 \rangle + \\ & + 7 \langle n'21 | \psi_{W12}^{eff} | n2 \rangle + 6 \langle n'21 | \psi_{I2}^{eff} | n2 \rangle - 2 \langle n'21 | \psi_T^{eff} | n2 \rangle \end{aligned} \quad (5.7)$$

$$\langle n'011 | H_{eff} | n211 \rangle = \sqrt{8} \langle n'01 | \psi_T^{eff} | n2 \rangle \quad (5.8)$$

Hay que tener en cuenta que se está trabajando con un hamiltoniano adimensional, ya que H_{eff} es el hamiltoniano efectivo en unidades de mc^2 .

En las expresiones (5.6), (5.7), (5.8), $\langle n'01 | \psi_\lambda^{eff} | n0 \rangle$ está definido como :

$$\langle n'01 | \psi_\lambda^{eff} | n0 \rangle = \langle n'01 | \psi_\lambda | n0 \rangle - \beta \langle n'01 | \exp(-dr_{12}^2) \psi_\lambda | n0 \rangle \quad (5.9)$$

este último elemento de matriz se calcula fácilmente, ya que :

$$\begin{aligned} \langle n'l' | \exp(-\alpha r_{12}^2) \psi_\lambda | n'l \rangle &= \\ &= \sum_{l=1}^G A_{\lambda l} \langle n'l' | \exp[-(\gamma + 2\alpha_{L\lambda}) r^2/\epsilon] | n'l \rangle \end{aligned} \quad (5.10)$$

con
$$\gamma = \frac{2\hbar^2}{Mm c^2} \alpha$$

Usando las expresiones anteriores se calculó la matriz H_{eff} , en la aproximación en que se toma solo un cierto número de cuantos, la cual fué diagonalizada; los eigenvalores obtenidos fueron comparados con el espectro en el cual se encontraba el valor óptimo de la energía calculada usando las bases correlacionadas.

A continuación se muestran los resultados obtenidos para el potencial T1, en la aproximación a cuatro cuantos.

Caso	Correlacionado	1.631	13.845	15.384	37.839	49.000
α	β					
1.25	0.8	1.648	13.683	15.385	37.629	47.658
1.3	0.8	1.605	13.637	15.384	37.548	47.691
1.15	1.0	1.677	13.750	15.388	37.354	47.207
1.2	1.0	1.610	13.678	15.385	37.215	47.247
1.2	1.1	1.641	13.719	15.387	37.216	47.148
1.25	1.1	1.570	13.644	15.385	37.067	47.184
1.25	1.2	1.643	13.721	15.387	37.219	47.134
1.3	1.2	1.568	13.643	15.385	37.057	47.165
1.3	1.3	1.681	13.757	15.389	37.361	47.162
1.35	1.3	1.604	13.676	15.386	37.185	47.188
1.50	1.5	1.702	13.757	15.389	37.639	47.374
1.55	1.5	1.628	13.682	15.386	37.457	47.383
1.65	1.6	1.686	13.726	15.388	37.744	47.528
1.7	1.6	1.616	13.659	15.386	37.569	47.528
1.85	1.7	1.637	13.662	15.386	37.768	47.693
1.9	1.7	1.574	13.600	15.384	37.608	47.685

Espectros de energía para el potencial efectivo a cuatro cuantos, usando el potencial T1.

De la tabla anterior se observa que existe un gran número de parejas α y β que predicen aproximadamente el espectro obtenido usando la base correlacionada. El mismo resultado se encontró para el potencial T2. Un detalle importante es que aún cuando el número de cuantos de la aproximación aumente, la existencia de varias parejas de parámetros de efectivización sigue persistiendo.

De lo anterior concluimos que no existe una relación biunívoca entre el problema con la base correlacionada y aquél en que se usa un potencial efectivo, sino que dado un par de parámetros de correlación a y b , les corresponde un conjunto de parámetros de efectivización α y β .

No nos fue posible encontrar un criterio para escoger alguna pareja de valores α y β , pero pensamos que el establecerlo será de gran importancia. El paso siguiente sería estudiar la dependencia de los parámetros de efectivización con los parámetros de correlación, o en otras palabras, encontrar las funciones $\alpha = \alpha(a, b)$ y $\beta = \beta(a, b)$

Esto nos permitiría calcular muy fácilmente los eigenvalores de energía correlacionada usando funciones de onda de oscilador.

Tabla III

Potencial	No. Cuantos	$a \text{ fm}^{-2}$	b
E	4	3.5	0.4
	8	3.0	0.5
	12	2.5	0.5
T1	4	2.5	0.9
	8	2.5	0.9
	12	3.0	0.9
T2	4	2.6	0.4
	8	2.5	0.5
	12	3.0	0.4

Valores óptimos de los parámetros a y b , para los potenciales E, T1 y T2.

5.4 Conclusiones.

La Tabla III, muestra los valores óptimos de los parámetros de correlación, para los potenciales usados en este trabajo. Se observa que el mejor valor de b , se encuentra alrededor de 0.5, en los potenciales E y T2, en tanto que para el potencial T1 es 0.9; es notorio que el valor de este parámetro es siempre menor que la unidad. Lo anterior indica que el usar un factor de correlación de la forma:

$$F(r_{12}) = 1 - \exp(-a r_{12}^2) \quad (5.10)$$

no es apropiado en general, pues se deben averiguar otros valores de b menores que uno, ya que de otra forma el usar la técnica de funciones correlacionadas puede resultar inútil, o bien sólo obtener ligeras mejorías.

También se observa que el parámetro b , no depende fuertemente del número de cuantos, lo cual nos permite calcular el valor de este parámetro para números bajos de cuantos, en donde los cálculos son más sencillos, y posteriormente hacer un análisis variacional pero sólo en los parámetros a y ϵ .

Respecto al parámetro a , es importante notar que para valores menores de 1 fm^{-2} , la técnica de funciones correlacionadas da resultados bastante desalentadores en todos los potenciales usados en este trabajo. Otro resultado importante es que la energía es poco sensible a cambios de este parámetro, para valores mayores que el valor óptimo.

Nótese, que los valores óptimos para α , se encuentran entre 2.5 fm^{-2} y 3.5 fm^{-2} , además el valor de este parámetro depende fuertemente del número de cuantos, y esta dependencia varía de potencial a potencial; así en el potencial E, al aumentar el número de cuantos, el valor de este parámetro disminuye, en tanto que para el potencial T1, crece al aumentar el número de cuantos; para el potencial T2, no se observa ninguna regularidad al aumentar el número de cuantos. La Tabla IV nos muestra los resultados para la energía, cuando se usa la base correlacionada y la base del oscilador.

Tabla IV

Potencial	No. Cuantos	ϵ_s	E_{s0}	a	b	ϵ_c	E_{bc}
E	4	24	-1.25	3.5	0.4	29	-1.8
	8	20	-1.42	2.5	0.5	28	-2.05
	12	17	-1.46	2.5	0.5	28	-2.15
T1	8	110	1.67	3	0.9	80	- .09
	12	110	-0.61	3	0.9	80	-1.28
T2	8	80	0.1	3	0.4	70	- .35
	12	85	-1.19	3	0.4	80	-1.39

ϵ_s se refiere al valor de ϵ para el cual se encontró la óptima energía, cuando se usó la B.O.; E_{s0} es el valor de esta energía en MeV; a y b son los parámetros de correlación, el primero dado en fm^{-2} y el segundo es adimensional, ϵ_c es el valor de ϵ para el cual se logra la óptima energía al usar la B.C., E_{bc} se refiere al valor de esta energía en MeV. Los resultados para el potencial E, usando la B.O., se obtuvieron del trabajo de Yeh(7).

Vemos claramente como en todos los casos la energía obtenida, usando la B.C., está más cerca de la energía experimental, la cual es de -2.22 MeV. De los potenciales usados, el potencial E es con el que se obtienen mejores resultados, así a 12 cuantos se logra un 96.8 % de la energía de amarre; recuérdese que este potencial solo presenta parte central, y que la función de onda de prueba, tanto cuando se usó la B.O. como la B. C., sólo contiene onda δ .

De los potenciales propuestos por Tamagaki, se observa que es en el potencial T1 en donde logramos mejores resultados, logrando a 12 cuantos un 57.6 % de la energía de amarre; el T2 fué el menos sensible al uso de correlaciones, lográndose un 62.6 % de la energía de amarre.

Respecto al valor de ϵ para el cual se logra el mínimo en el caso correlacionado, es notorio que para los potenciales T1 y T2, este es menor en el caso correlacionado, en tanto que para el potencial E, es mayor en el caso correlacionado. Se ve que en este último potencial, ϵ_c varía muy poco al aumentar el número de cuantos, en tanto que ϵ_s disminuye notablemente.

Creemos que sería útil el usar este tipo de funciones de onda, en problemas de 3 o más cuerpos²⁰⁾, así como ver los resultados que se obtendrían en el modelo de capas²¹⁾, al usar esta base correlacionada.

También es de interés obtener $\langle r'^2 \rangle$ y Q en las dos bases, para lo cual serían útiles las expresiones deducidas en los capítulos 2 y 4.

5.5 Índice de Figuras.

Fig. 5.1: Curvas de energía $E_2(E, b)$ obtenidas usando la base de funciones correlacionadas a cuatro cuantos, con $a = \epsilon^2 e$ y $\epsilon = 25$ para el potencial E. Nótese que el mínimo aparece en la curva correspondiente al valor $a = 3.5 \text{ fm}^{-2}$, para $a = 0$ se tiene la energía usando la B.O.

Fig. 5.2: Curvas de energía $E_2(E, a)$, para distintos valores de b , $\epsilon = 25$, para cuatro cuantos. Para $b = 0$ se tiene la energía correspondiente a la B.O.. Nótese el comportamiento de la energía para pequeños valores de ϵ . El mínimo se obtiene para $b = 0.4$ y $a = 3.5 \text{ fm}^{-2}$.

Fig. 5.3: Curvas de energía $E_2(T_2, a)$ para valores pequeños de a , con $\epsilon = 25$ y los valores de b mostrados. Para $b = 1$ es el único caso que la energía no está cerca del valor no correlacionado para pequeños valores de a .

Fig. 5.4: Curvas de energía $E_4(T_2, a)$, $E_6(T_2, a)$ para ocho y doce cuantos con $b = 0.4$ y $\epsilon = 70$, también se muestran las curvas para $b = 0$ que corresponden a la energía $E_4(T_2)$ y $E_6(T_2)$ calculada usando la B.O.. Véase que para $a < 1 \text{ fm}^{-2}$ las curvas $E_4(T_2, a)$ y $E_6(T_2, a)$ están arriba de las curvas $E_4(T_2)$ y $E_6(T_2)$.

Fig. 5.5: Curvas de energía $E_4(E, b)$ y $E_6(E, b)$ para $a = 3.5 \text{ fm}^{-2}$, $\epsilon = 25$, para ocho y doce cuantos. También se muestran las curvas para $a = 0$ que corresponde a usar la B.O.. Para $a = 0$ y $b = 1$ no está definido el valor de la energía. El mínimo para ocho y doce cuantos se obtiene para $b = 0.5$.

Fig. 5.6: Comparación de las curvas de energía obtenidas usando la B.C. y la B.O. a cuatro cuantos para los potenciales T1 y T2. $E_2(T_1)$ y $E_2(T_2)$ son las curvas que se obtienen con la B.O.; $E_2(T_1, \epsilon)$ con $a = 2.5 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0.9$, $E_2(T_2, \epsilon)$ con $a = 2.6 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0.4$, son las curvas que se obtienen usando la B.C.

Fig. 5.7: Comparación de las curvas de energía obtenidas usando la B.C. y la B.O. a ocho cuantos para los potenciales T1 y T2. $E_4(T_1)$ y $E_4(T_2)$ son las curvas obtenidas con la B.O.; $E_4(T_1, \epsilon)$ con $a = 3 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0.9$, $E_4(T_2, \epsilon)$ con $a = 3 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0.4$, son las curvas obtenidas con la B.C.

Fig. 5.8: Comparación de las curvas de energía obtenidas usando la B.C. y la B.O. a doce cuantos para los potenciales T1 y T2. $E_6(T1)$ y $E_6(T2)$ son las curvas obtenidas con la B.O.; $E_6(T1, \epsilon)$ con $a = 3 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0,9$, $E_6(T2, \epsilon)$ con $a = 3 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0,4$, son las curvas que se obtienen usando la B.C.

Fig. 5.9: Comparación de las curvas de energía calculadas con la B.O. y la B.C. a cuatro cuantos para el potencial E. $E_2(E)$ es la curva para la B.O. y $E_2(E, \epsilon)$ con $a = 3.5 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0.4$, es la curva para la B.C.

Fig. 5.10: Comparación de las curvas de energía calculadas con la B.O. y la B.C. a ocho y doce cuantos para el potencial E. $E_4(E)$ y $E_6(E)$ son las curvas correspondientes a la B.O.; -- $E_4(E, \epsilon)$ con $a = 2.5 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0,5$, $E_6(E, \epsilon)$ con $a = 2.5 \text{ fm}^{-2}$ y $b = 0,5$, son las curvas para la B.C.

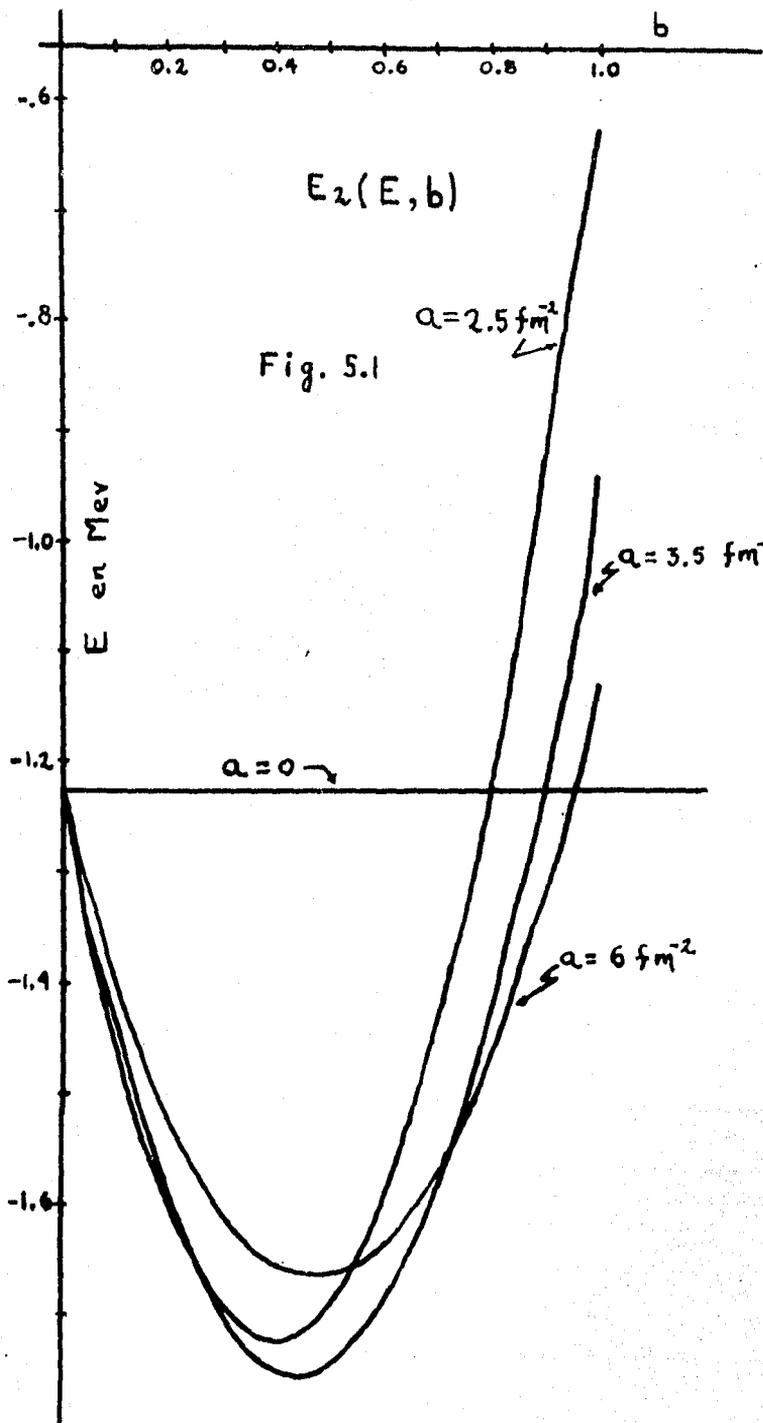


Fig. 5.2

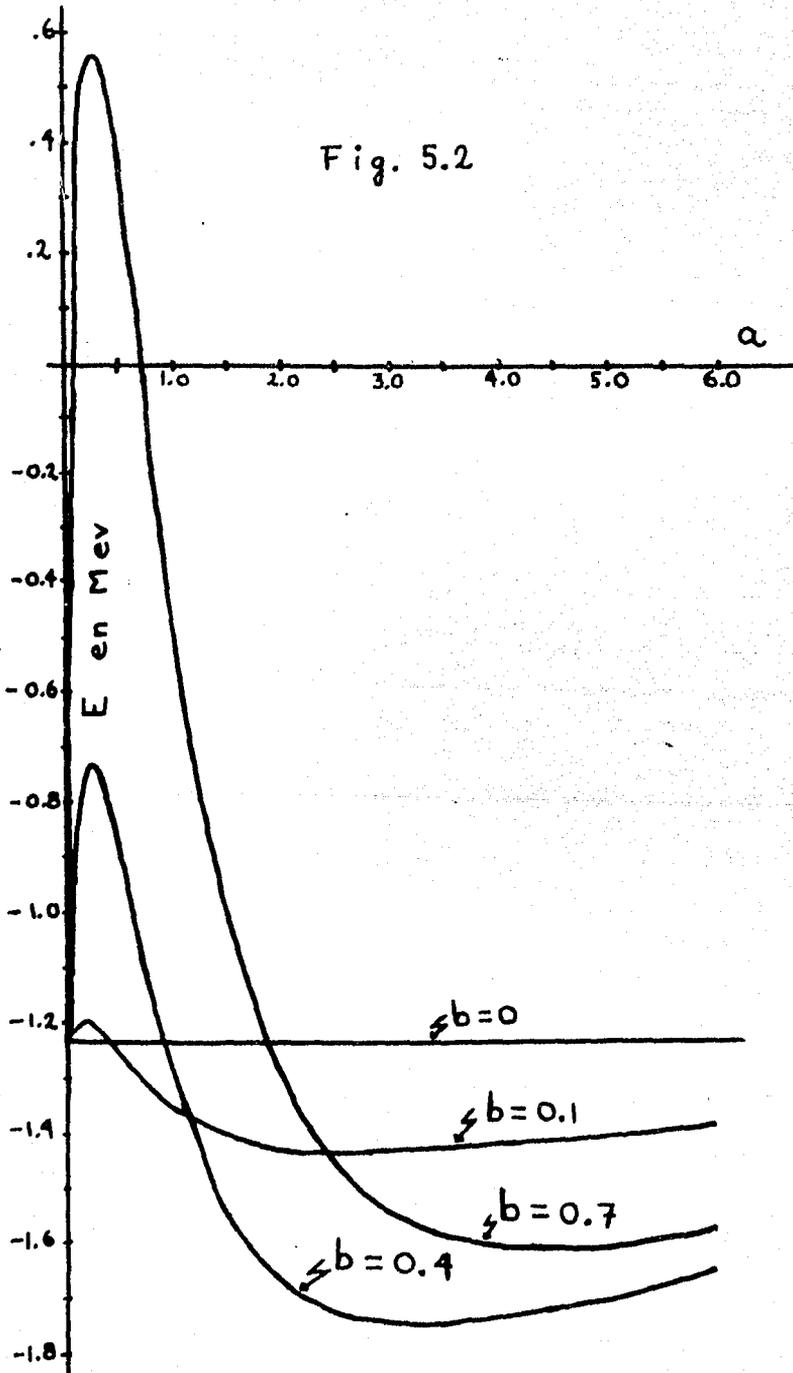
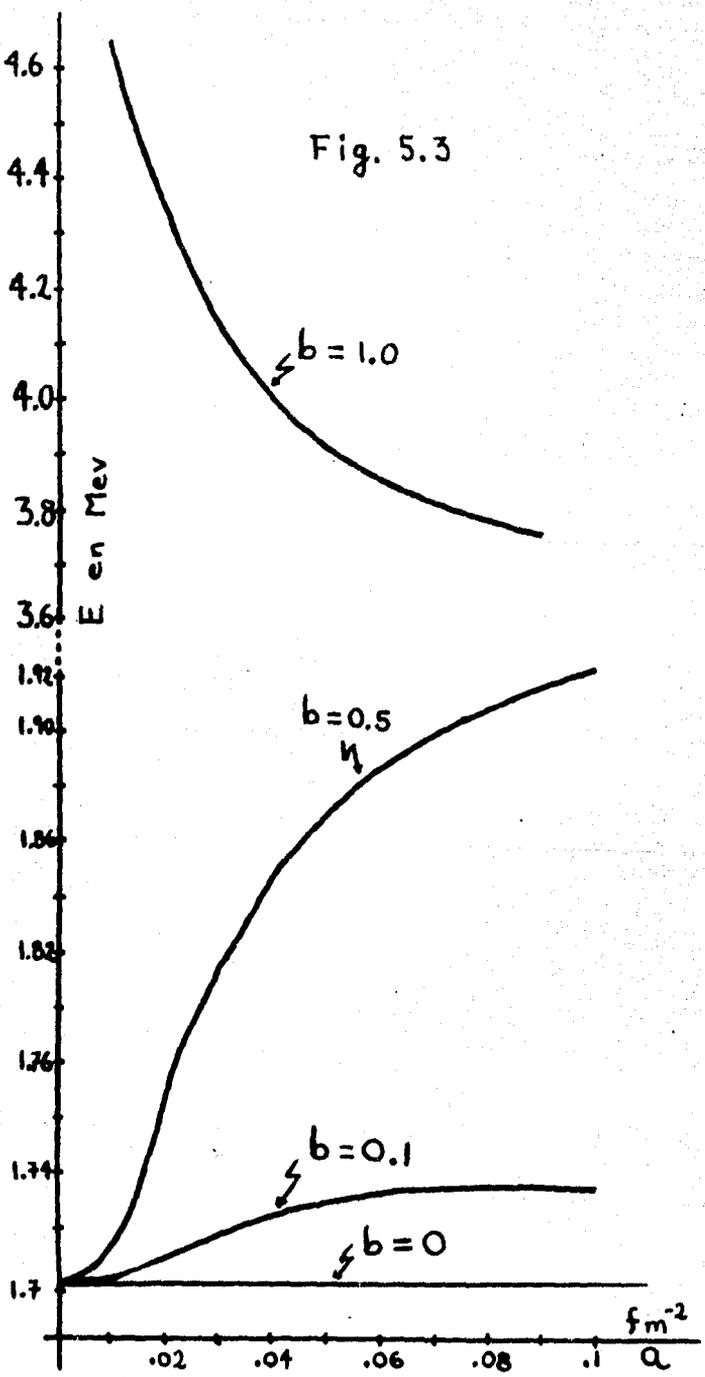


Fig. 5.3



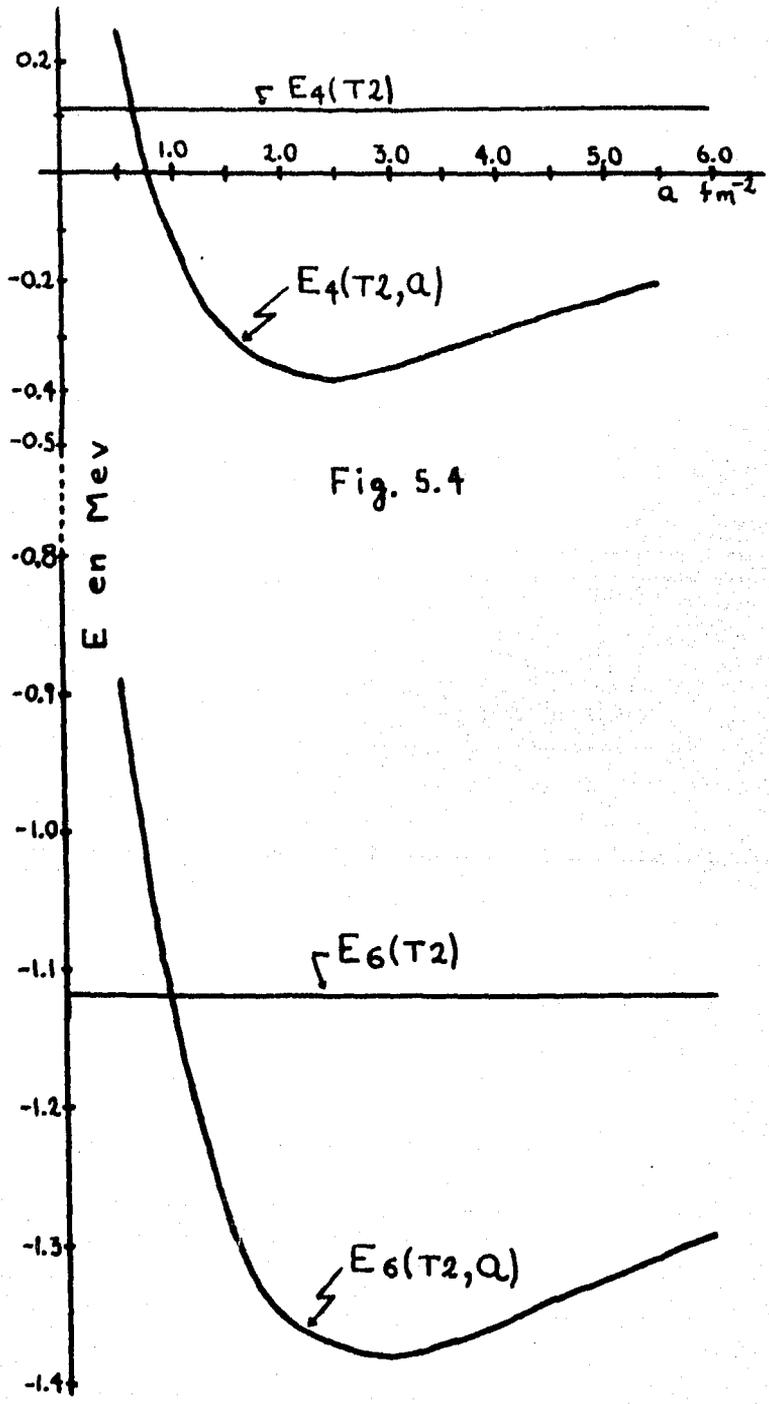


Fig. 5.4

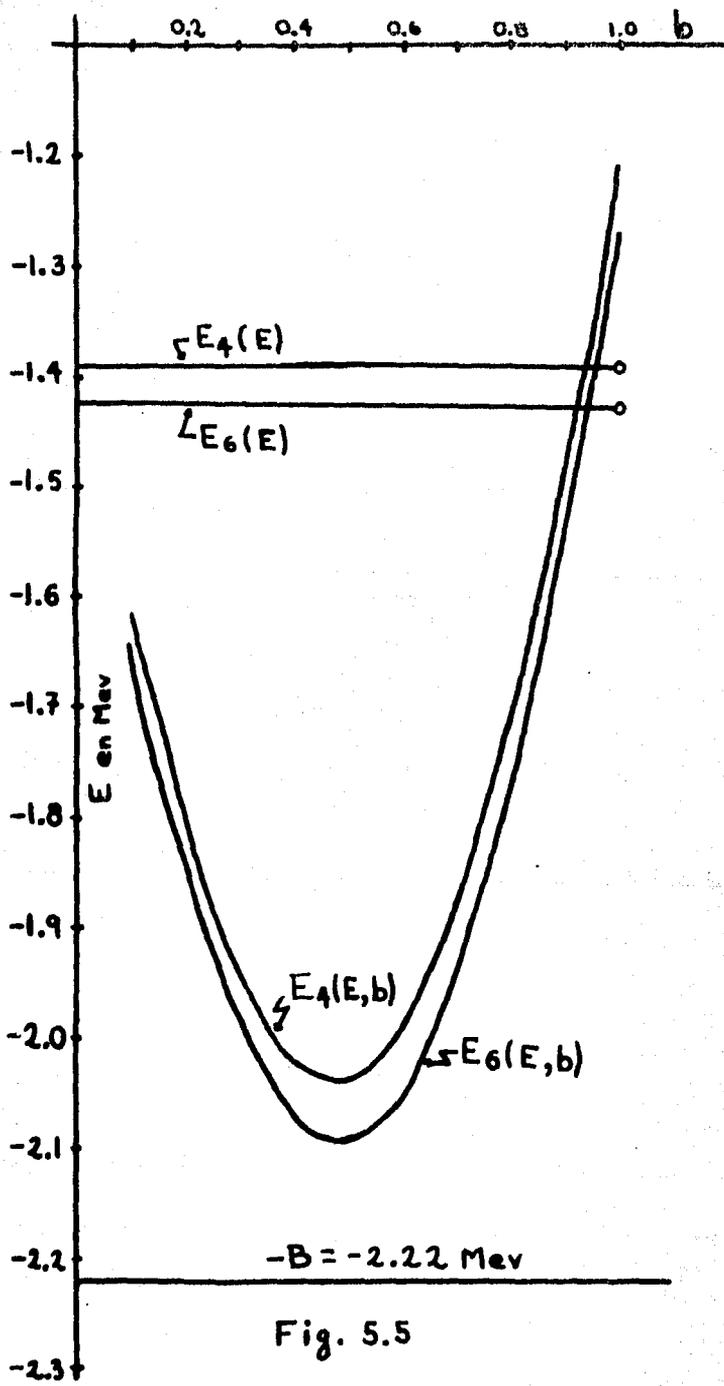


Fig. 5.5

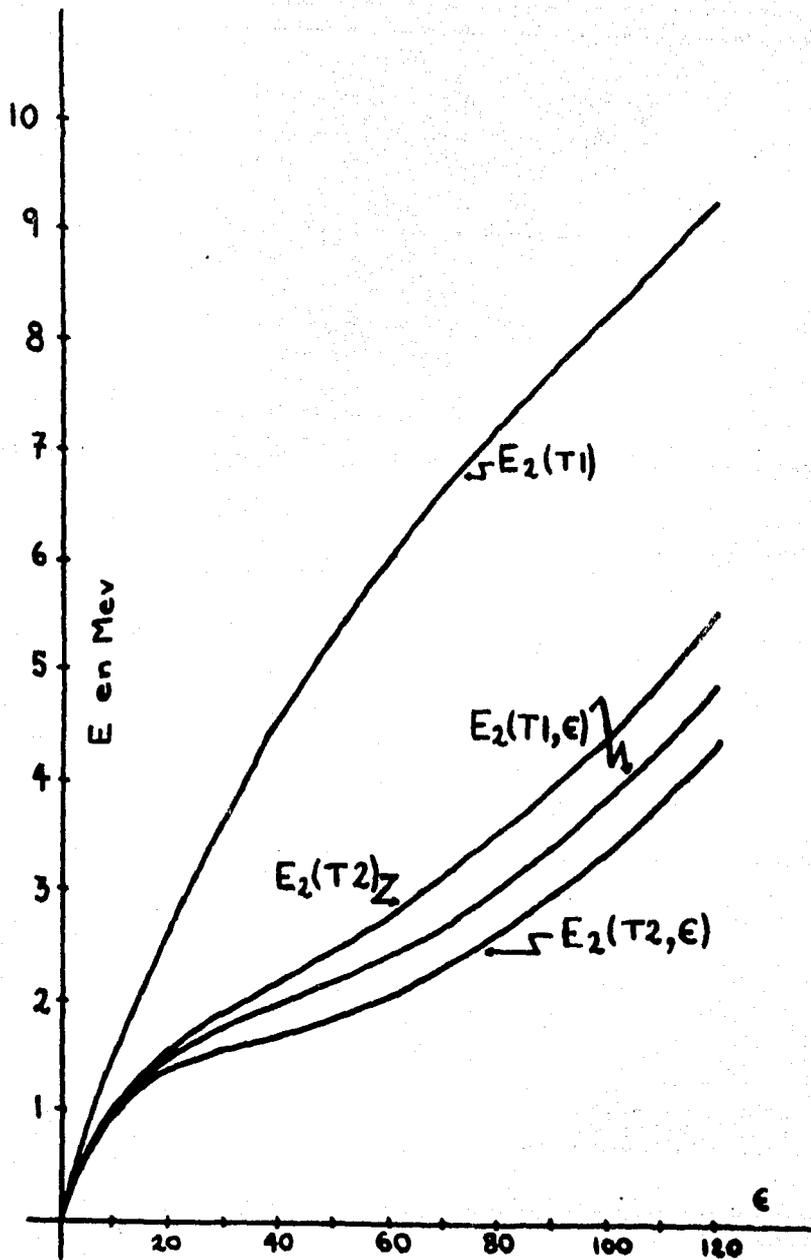


Fig. 5.6

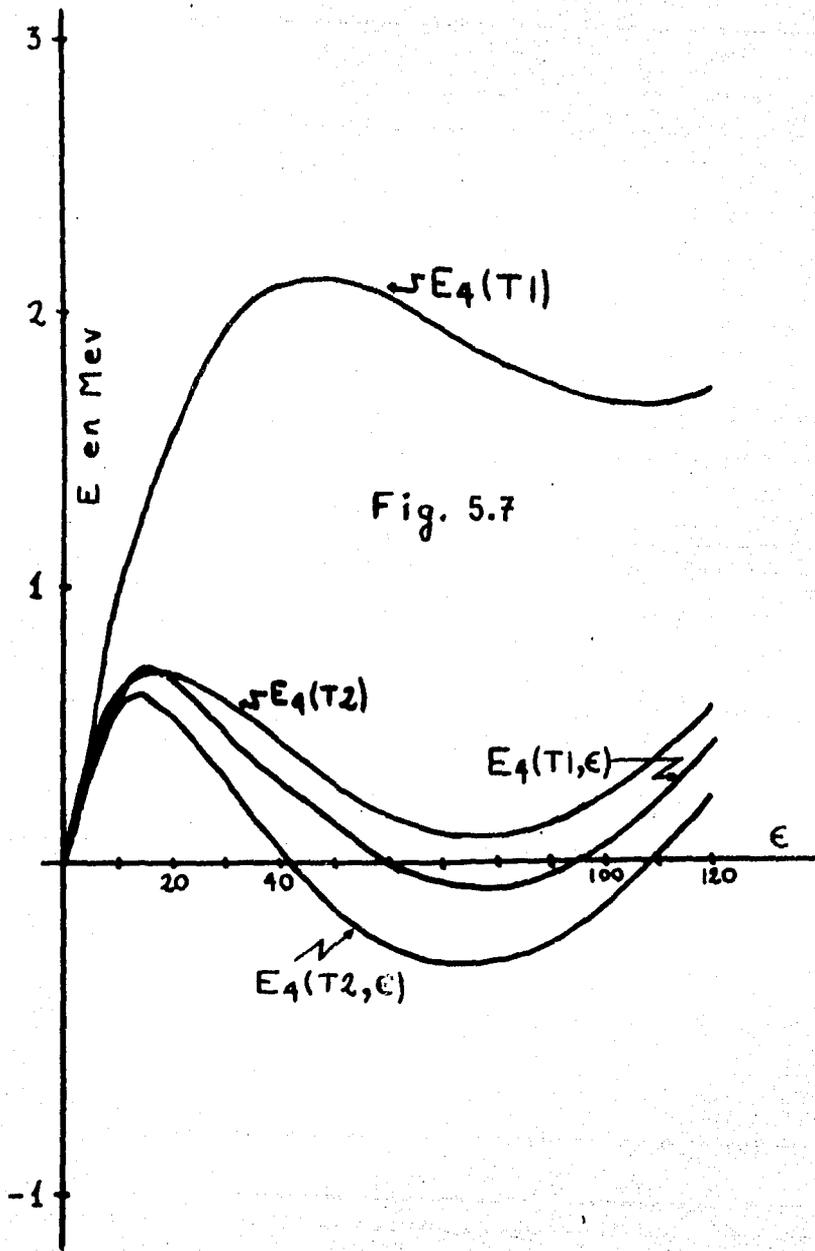
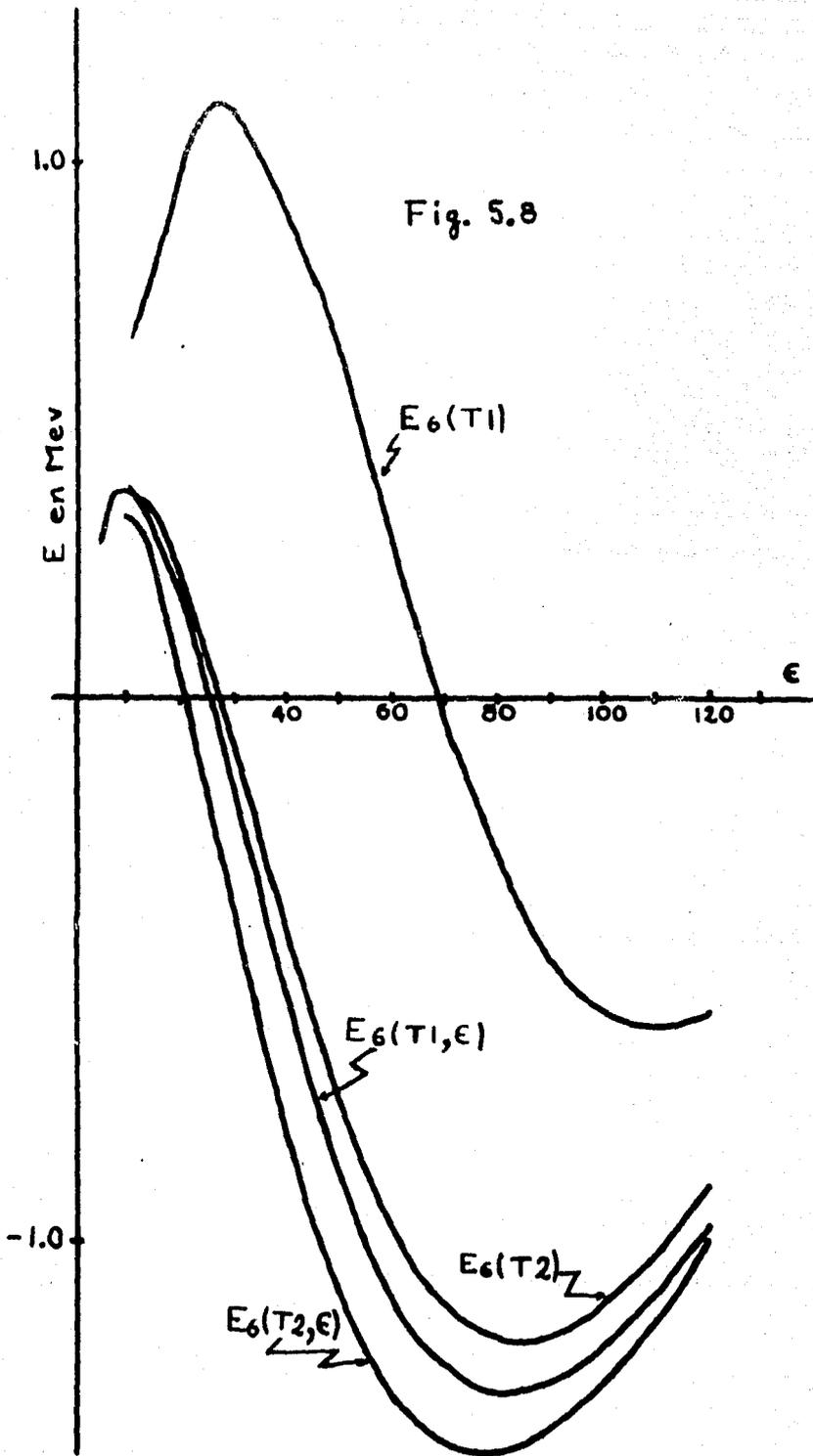
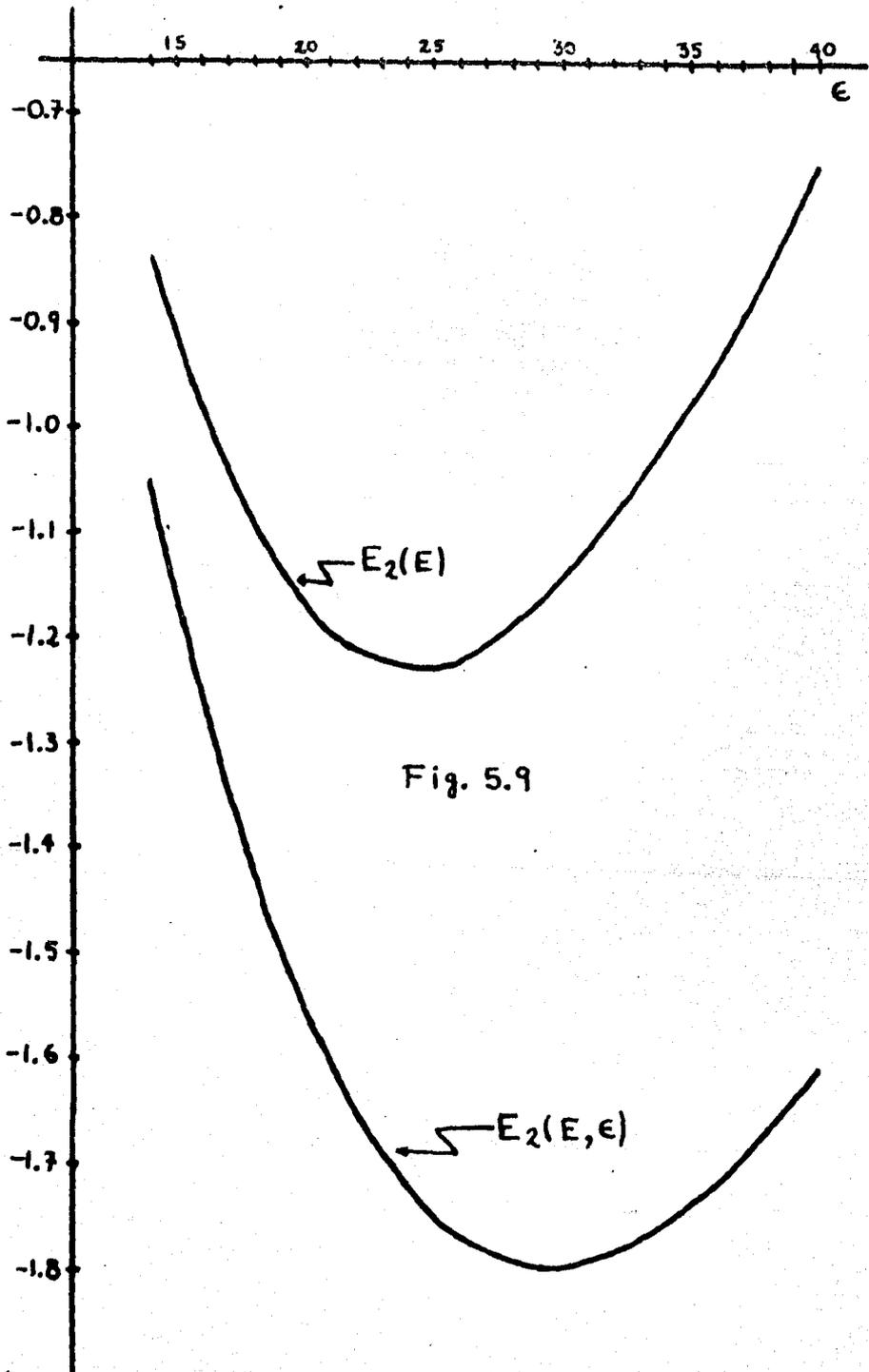


Fig. 5.7





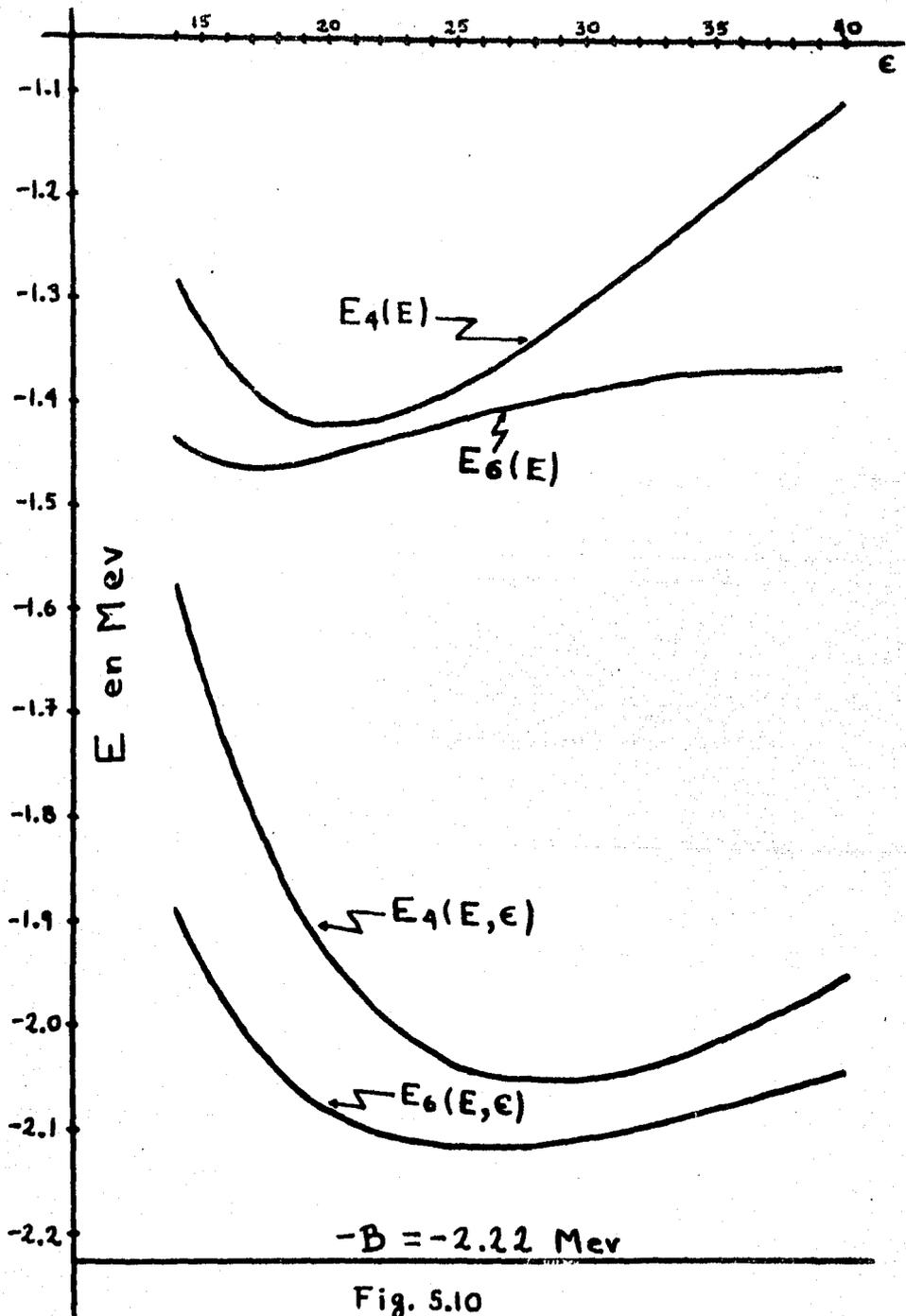


Fig. S.10

CONCLUSIONES

Se ha demostrado¹⁰⁾ que al hacer un análisis variacional usando estados de oscilador y suponiendo un potencial central arbitrario $V(r)$, la mejoría en la energía de amarre ocurre cuando se incrementa el número de cuantos en cuatro. En este trabajo hemos encontrado un comportamiento cualitativamente similar para potenciales que contienen partes no centrales, con la diferencia de que para éstos logramos una mejoría apreciable al cambiar de cero a dos cuantos, pero para números mayores de cuantos, la mejoría también se logra al aumentar en cuatro el número de cuantos. Esto hace suponer que este comportamiento es independiente de que el potencial contenga partes no centrales.

Hemos visto también que es inconveniente usar la base del oscilador para los potenciales propuestos por Tamagaki, ya que para poder obtener resultados satisfactorios se deben hacer cálculos con un número máximo de cuantos muy grande.

Encontramos que uno de los potenciales fenomenológicos usados (TI) predice para el deuterón una energía de amarre ligeramente mayor que la experimental, lo cual lo elimina como potencial razonable.

El usar una base de funciones de onda que tome en cuenta que la interacción nucleón-nucleón es repulsiva a cortas distancias y que además se puede construir fácilmente a partir de las funciones de oscilador, nos permite obtener mejores resultados para la energía de amarre. Así, para el potencial E , a 12 cuantos se obtiene un 96 % de la energía experimental, en tanto que se obtiene 66 % usando la base de oscilador.

Si el factor de correlación es del tipo :

$$F(r_{12}) = 1 - b \exp(-Qr_{12}^2)$$

encontramos que el valor óptimo de b siempre es menor que la unidad, por lo que el proponer a priori $b=1$, no es adecuado. El valor de este parámetro depende muy poco del número de cuantos.

Por último encontramos que el valor óptimo del parámetro Q es cercano a 3 fm^{-2} , notándose que la energía es poco sensible a cambios en su valor, cuando Q está cerca de su valor óptimo.

Por los resultados que hemos obtenido pensamos que el uso de bases correlacionadas sería de gran utilidad al tratar el problema de pocos nucleones, dando el presente trabajo algunos criterios para obtener los valores óptimos de los parámetros de correlación.

REFERENCIAS

1. - H. Enge, Introduction to nuclear physics.
2. - M. J. Moravcsik, The two-nucleon interaction (Oxford University Press, 1963).
3. - Green, A.E.S., MacGregor, M.H. y Wilson, R., 1967, Rev. Mod. Phys. 39 (1967) 498.
4. - M. de Llano y V. Canuto, Fuerzas Nucleón-Nucleón, México (1968).
5. - R. Tamagaki, Progress of Theoretical Physics, 39 (1968) 90.
6. - H. Eikemeier and H.H. Hackenbroich, Zeitschrift für Physik, 195 (1966) 412.
7. - W. W. Yeh, Rev. Mex. de Fís. 18 (1969) 11.
8. - S. De Benedetti, Nuclear Interactions (John Wiley, 1964).
9. - R. Tamagaki and W. Watari, Supplement Progress of Theoretical Physics 39 (1967) 84.
10. - M. Moshinsky, The Harmonic Oscillator in Modern Physics: from atoms to quarks. (Gordon and Breach, 1969).
11. - M. Moshinsky and T.A. Brody, Rev. Mex. Fís. IX, 4 (1960) 181.
12. - M. Moshinsky, T. A. Brody and G. Jacob, Nuclear Physics 17 (1960) 16.
13. - T. A. Brody and M. Moshinsky, Tables of transformation brackets for nuclear shell-model calculations, second edition (Gordon and Breach 1967).
14. - R. Jastrow, Phys. Rev. 98 (1955) 5.
15. - J.W. Clark and P. Westhaus, Phys. Rev., 141 (1966) 833.
16. - C. Ciofi Degli Atti, Phys. Rev. 175 (1968) 1256.

- 17.- I. Talmi, *Helv. Phys. Acta* 25 (1952) 185.
- 18.- V. C. Aguilera, *Comunicación Privada*.
- 19.- J. Flores Valdés, *Comunicación Privada*.
- 20.- M. de Llano, *Comunicación Privada*.

- 17.- I. Talmi, Helv. Phys. Acta 25 (1952) 185.
- 18.- V. C. Aguilera, Comunicación Privada.
- 19.- J. Flores Valdés, Comunicación Privada.
- 20.- M. de Llano, Comunicación Privada.

17. - I. Talmi, *Helv. Phys. Acta* 25 (1952) 185.
18. - V. C. Aguilera, *Comunicación Privada*.
19. - J. Flores Valdés, *Comunicación Privada*.
20. - M. de Llano, *Comunicación Privada*.