



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS

“UN MODELO ALGEBRAICO PARA
MOLÉCULAS NUCLEARES DE
DOS Y TRES CÚMULOS ”

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE:

DOCTOR en CIENCIAS

P R E S E N T A:

HUITZILIN YÉPEZ MARTÍNEZ

DIRECTOR:

Dr. PETER OTTO HESS BECHSTEDT.

COMITÉ TUTORAL:

Dr. ALEJANDRO FRANK HOEFELICH

Dr. ROELOF BIJKER BIJKER

México D.F. Octubre 2003



posgrado en ciencias físicas
u n a m



Posgrado en ciencias físicas
unam

1

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

Biblioteca Central



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.

PAGINACION DISCONTINUA

Para Alma con todo mi amor

A mis padres con amor

A mis hermanos

A la memoria de todos mis seres queridos

A todos mis amigos

Autorizo a la Dirección General de Bibliotecas de la UNAM a difundir en formato electrónico e impreso el contenido de mi trabajo académico.

NOMBRE: YEPEZ MARTINEZ

HUITZILLEN

FECHA: 27 - Oct - 2003

FIRMA: [Firma manuscrita]

2

**TESIS CON
FALLA DE ORIGEN**

Agradecimientos

Quiero agradecer al doctor Peter Hess por darme la oportunidad de realizar mi tesis bajo su dirección, así como por todos sus valiosos comentarios y sugerencias.

También quiero agradecer a los doctores Alejandro Frank y Roelof Bijker por sus valiosos comentarios como parte de mi comité tutorial.

Agradezco a la doctora Tatiana Belyaeva y a los doctores Jorge Hirsch, Elpidio Chacón, Arturo Menchaca y Elí Aguilera por revisar esta tesis y por todos sus comentarios.

A la Universidad Nacional Autónoma de México y al Instituto de Ciencias Nucleares (I.C.N.) de esta Universidad por todas las oportunidades y facilidades dadas para mi formación académica.

A Andrés Porta por su amistad y ayuda de siempre, así como por todos sus valiosos comentarios. Al doctor Francisco Morales por todo su apoyo, ayuda y amistad otorgadas durante mi formación académica. Al doctor Luis Urrutia por todas sus atenciones, comentarios y sugerencias que siempre me ayudaron a tomar muchas decisiones.

A la DGEF-UNAM por la beca de posgrado otorgada para la realización de mis estudios y a la DGAPA (proyecto IN 119002) por los apoyos económicos para la asistencia a diversos eventos académicos.

A mis compañeros del I.C.N. especialmente a Sergio, Juan Manuel y Samuel por brindarme su amistad y compartir sus conocimientos y experiencias.

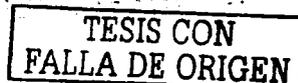
A Alejandro Durán por ser un gran amigo, maestro y compañero. A mis compañeros del posgrado en ciencias físicas por todas sus atenciones. A mi amiga Marcela por todo su apoyo amistad y ayuda siempre desinteresadas, gracias Marcela.

A mis compañeros y amigos del Instituto de Investigaciones en Materiales (I.I.M.), por todo su apoyo y amistad. Especialmente a Raúl Escamilla por toda su ayuda y consideraciones de siempre, a Roberto, Roman y Angelica por todos los libros que siempre me apartaban en la biblioteca de este instituto. A Sigfredo, Roberto y al señor Angel por todos los momentos que compartimos los fines de semana en el I.I.M.

A la familia Heredia Velasco por todas sus atenciones de siempre y su ayuda para la terminación de esta tesis.

Índice General

| | |
|---|-----------|
| RESUMEN | IX |
| SUMMARY | XI |
| 1. INTRODUCCIÓN. | 1 |
| 2. MOLÉCULAS NUCLEARES. | 5 |
| 2.1. Moléculas nucleares con dos cúmulos | 5 |
| 2.2. Modelos teóricos para las moléculas nucleares con dos cúmulos. | 8 |
| 2.2.1. Modelos colectivos | 9 |
| 2.2.2. Modelos microscópicos | 13 |
| 2.3. Moléculas nucleares de tres cúmulos | 15 |
| 3. MODELOS ALGEBRAICOS PARA MOLÉCULAS NUCLEARES. | 21 |
| 3.1. Modelos vibrónico y de bosones interactuantes (IBM). | 21 |
| 3.1.1. El modelo vibrónico U(4) | 21 |
| 3.1.2. Modelo de Bosones Interactuantes (IBM) | 25 |
| 3.2. Modelo algebraico para moléculas nucleares sin estructura interna. | 29 |
| 3.2.1. Relación del Hamiltoniano algebraico con el potencial geométrico. | 34 |
| 3.3. Modelo algebraico para moléculas nucleares con estructura interna. | 36 |
| 3.4. Contenido geométrico del modelo algebraico. | 40 |
| 3.5. Aplicaciones del modelo algebraico a los sistemas $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$ | 44 |
| 3.5.1. Molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ | 44 |
| 3.5.2. Ajuste del potencial mapeado al potencial calculado mediante el método de "doble-convolución" para la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ | 52 |
| 3.5.3. Aplicación del modelo algebraico al sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$ | 58 |
| 4. MODELO ALGEBRAICO PARA MOLÉCULAS DE 3 NÚCLEOS. | 65 |
| 4.1. Modelo algebraico para moléculas de 3 núcleos con estructura interna. | 65 |
| 4.1.1. Conexión geométrica del modelo algebraico para moléculas de 3 cúmulos. | 70 |

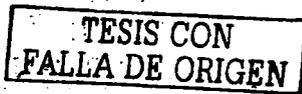


| | | |
|-----------|--|------------|
| 4.2. | Aplicación del modelo algebraico para moléculas de tres cúmulos a la molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$. | 74 |
| 4.2.1. | Ajuste del potencial mapeado al potencial calculado mediante el método de "doble-convolución" para la molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$. | 74 |
| 4.2.2. | Molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ en una Configuración Triangular. | 76 |
| 4.2.3. | Molécula nuclear de tres cúmulos en una configuración lineal . . . | 82 |
| 5. | CONCLUSIONES. | 89 |
| | APÉNDICES | 93 |
| A. | POTENCIALES MOLECULARES. | 95 |
| A.1. | Potenciales moleculares calculados por el método de "doble-convolución" | 95 |
| B. | GRUPO DE SIMETRÍA $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$. | 99 |
| B.1. | Posibles cadenas dinámicas del grupo de simetría $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$ | 99 |
| | BIBLIOGRAFÍA | 114 |

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Índice de Figuras

| | |
|--|----|
| 2.1. Esquema del proceso de formación y separación de las moléculas nucleares de dos cúmulos ligeros, debido a la corta vida media de estas moléculas, los núcleos que las forman sólo alcanzan a dar medio giro o máximo un giro alrededor uno del otro. | 6 |
| 2.2. Diagrama del mecanismo de doble resonancia para la formación de las moléculas nucleares de dos cúmulos. En la figura se muestra un canal elástico para una energía E^* que al desexcitarse decae a un estado ligado dentro del potencial internuclear. | 10 |
| 2.3. Diagrama de la ventana molecular y la línea de Yrast, en este diagrama se puede notar que las resonancias de la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ se encuentran dentro de esta ventana molecular [2]. | 12 |
| 2.4. Diagrama del potencial molecular, en función de la separación entre los núcleos, en el modelo de capas para dos centros; como función de la separación entre los núcleos. | 14 |
| 2.5. Esquema de la evolución de la estructura de bandas de la molécula nuclear de dos cúmulos, para el caso de moléculas nucleares no simétricas, en función de la separación entre los dos núcleos [2]. | 16 |
| 2.6. Diagrama de la configuración lineal de una molécula nuclear de tres cúmulos, en donde se indican algunos de los movimientos relativos que pueden efectuar los núcleos. | 19 |
| 3.1. Espectro característico, correspondiente al Hamiltoniano algebraico correspondiente al límite $\text{SO}(4)$ del modelo algebraico $\text{U}(4)$ | 32 |
| 3.2. Comparación de los espectros de energía experimental y teórico del modelo algebraico $\text{SO}(4)$, para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$. En esta gráfica los valores teóricos están representados por las curvas sólidas y los valores experimentales por los puntos negros y huecos, donde la paridad de estos últimos no se ha establecido completamente de manera experimental [41]. | 33 |
| 3.3. Potencial geométrico asociado con el valor de expectación del Hamiltoniano (3.38), para el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ | 37 |



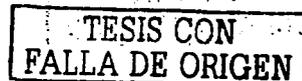
| | |
|---|----|
| 3.4. Diagrama de una molécula nuclear definida respecto al sistema de referencia intrínseco de la molécula. En este sistema el eje z conecta los dos centros de masa. Para el caso de núcleos prolatos, las líneas diagonales indican los ejes de simetría de los núcleos. Para el caso de núcleos oblatos, los ejes de simetría serán perpendiculares a estas líneas diagonales. | 41 |
| 3.5. Espectro de energía de la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, para el caso del modelo algebraico con estructura interna de los núcleos. En la parte izquierda de esta gráfica se muestran los datos experimentales y en la parte derecha los resultados teóricos. | 50 |
| 3.6. Comparación del espectro teórico para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, en el modelo $\text{SO}(4)$ sin estructura interna [41] y en nuestro modelo $\text{U}(3)$ con estructura interna. | 52 |
| 3.7. Clasificación de los niveles de energía para la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ en nuestro modelo con estructura interna. | 53 |
| 3.8. Comparación entre el potencial de "doble-convolución" (DC) y el potencial que resulta del mapeo geométrico (MG) del Hamiltoniano del modelo, para la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, para dos diferentes orientaciones simétricas de los ejes de simetría de los núcleos $\Theta_{21} = -\Theta_{22} = 0^\circ, 15^\circ$ con $\theta_{21} = \Theta_{21} + 90^\circ$ | 54 |
| 3.9. Comparación de los potenciales de "doble-convolución" (DC) y el potencial que resulta del mapeo geométrico (MG), con los parámetros $\{\chi_s\}$ determinados con las condiciones consideradas en esta sección. Para el caso en que no se consideran en el Hamiltoniano el término proporcional a χ_N | 56 |
| 3.10. Relación entre los parámetros χ_T y χ_ω obtenidas al reproducir el potencial de "doble-convolución" para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ | 57 |
| 3.11. Comparación de los potenciales de "doble-convolución" (DC) y el potencial resultante del mapeo geométrico (MG), para los valores de los parámetros $\{\chi_s\}$ obtenidos de las cuatro condiciones de esta sección. | 58 |
| 3.12. Espectro de energía para el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, que resulta de ajustar los parámetros del Hamiltoniano partiendo de un potencial intermolecular conocido del cálculo de "doble-convolución". Donde se muestra el espectro resultante para dos diferentes conjuntos de valores de parámetros $\{\chi_s\}$ en función del valor de χ_ω indicado en los dos paneles. | 59 |
| 3.13. Potenciales moleculares, para el sistema $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$, asociados con el mapeo geométrico (MG) del Hamiltoniano 3.53 y los que resultan de la técnica de "doble-convolución" (DC), para dos orientaciones diferentes $\theta = 0^\circ$ y 15° , de los ejes de simetría de los núcleos. | 62 |

| | |
|---|----|
| 3.14. Espectro de energía, del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, resultado de considerar los valores de los parámetros del Hamiltoniano (3.53). En este espectro sólo se muestran las cabezas de la bandas vibracionales para cada banda rotacional. También se pueden observar los primeros estados excitados del núcleo ^{96}Sr (extremo izquierdo) y del núcleo ^{146}Ba (extremo derecho). | 63 |
| 3.15. Estructura rotacional del espectro de energía del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, para la banda vibracional base y las primeras bandas vibracionales excitadas. | 63 |
| 4.1. Diagrama de una molécula nuclear de tres cúmulos, definida respecto al sistema de referencia intrínseco de la molécula. En este sistema el eje z conecta los centros de masas de los núcleos pesados y el eje x, perpendicular al eje z, dirigido hacia arriba en el plano de esta figura. | 67 |
| 4.2. Acoplamientos considerados para la extensión del modelo de dos cúmulos al caso de moléculas de tres cúmulos. | 68 |
| 4.3. Valores permitidos para los parámetros del Hamiltoniano (4.5), obtenidos al reproducir con el potencial mapeado las principales características del potencial de "doble-convolución". | 79 |
| 4.4. Potencial internuclear en la coordenada ρ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$ y $\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$, que resulta de reproducir las cuatro condiciones del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$. | 80 |
| 4.5. Potencial internuclear en la coordenada λ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$ y $\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$, que resulta de reproducir las cuatro condiciones del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$. | 80 |
| 4.6. Espectro de energía para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ obtenido al reproducir el potencial armónico de "doble-convolución" para esta molécula. En la figura únicamente se muestran las cabezas de las bandas vibracionales, debido a que las bandas rotacionales se encuentran en una escala de energías mucho menor. | 81 |
| 4.7. Configuración lineal considerada en el modelo algebraico para moléculas de tres cúmulos, con los centros de masa de los tres núcleos a lo largo del eje molecular z, con $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$ y $\theta_\lambda = 0^\circ$. | 83 |
| 4.8. Valores permitidos, para el caso de la configuración lineal de la figura (4.7), de los parámetros del Hamiltoniano (4.5). | 84 |

| | |
|--|----|
| 4.9. Potencial internuclear en la coordenada ρ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$ y $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$, que resulta de reproducir las características principales del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ en una configuración de equilibrio de tipo lineal. | 85 |
| 4.10. Potencial internuclear en la coordenada λ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$ y $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$, que resulta de reproducir las características principales del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ en una configuración de equilibrio de tipo lineal. | 86 |
| 4.11. Espectro de energía para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ obtenido al reproducir el potencial armónico de "doble-convolución" para esta molécula, considerando el caso de una configuración de equilibrio de tipo lineal. Nuevamente, en esta figura únicamente se muestran las cabezas de las bandas vibracionales, las bandas rotacionales se encuentran en una escala de energías mucho menor. | 87 |

Índice de Tablas

| | |
|---|-----|
| 3.1. Valores experimentales de los niveles de energía, en unidades de MeV, de la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, dadas en las Refs. [24, 41], clasificados por su momento angular. | 34 |
| 3.2. Representaciones irreducibles utilizadas para el ajuste del espectro energético del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ | 47 |
| 3.3. Espectro de energía del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, en el modelo con estructura interna, ($U_R(3)=U(3)$) comparado con los resultados experimentales (Exp.) y los del modelo ($SO_R(4) = SO(4)$) [24, 41]. | 49 |
| B.1. Operadores de Casimir pertenecientes a los diferentes subgrupos del grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$ | 101 |
| B.2. Valores de expectación para los operadores de Casimir asociados con los diferentes subgrupos del grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$ | 102 |



RESUMEN.

En este trabajo de investigación se presenta un nuevo modelo algebraico, de tipo fenomenológico, para la descripción de moléculas nucleares de dos y tres cúmulos, considerando la estructura interna de las moléculas.

Para moléculas de dos cúmulos, el Hamiltoniano del modelo propuesto utiliza una simetría de grupos $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4) \supset SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes SU_R(3)$.

También se considera el mapeo geométrico del Hamiltoniano del modelo, utilizando estados coherentes como estados de prueba. Con este mapeo pudo establecerse la conexión entre el contenido geométrico del Hamiltoniano y los potenciales moleculares, relacionando el parámetro del estado de prueba con la separación relativa entre los núcleos.

Aplicando el modelo algebraico con estructura interna al sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, se reprodujo su espectro de resonancias moleculares. También se obtuvo el potencial geométrico asociado con el Hamiltoniano algebraico. Este potencial geométrico y el potencial molecular de "doble-convolución" presentan un comportamiento similar en las cercanías del mínimo de energía.

El mapeo geométrico del Hamiltoniano algebraico se utilizó para reproducir las características más importantes de los potenciales moleculares de "doble-convolución" de la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y de la hipotética molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$.

Al reproducir los potenciales de "doble-convolución" con el potencial mapeado se encontraron algunas restricciones para los valores permitidos de los parámetros del Hamiltoniano.

Con estas restricciones se obtuvieron espectros característicos de la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$. Para algunos valores de los parámetros del Hamiltoniano se reprodujo el espectro experimental de esta molécula. Para el caso del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, también se obtuvieron espectros característicos.

Este último método es muy importante para moléculas nucleares para las que en la actualidad no existen datos experimentales de su espectro. Esto debido a que si se calcula el potencial molecular de "doble-convolución" y se obtienen las restricciones para los parámetros del modelo, es posible determinar las características generales de sus espectros.

Para el caso de moléculas nucleares de tres cúmulos, se presenta una extensión del modelo para moléculas de dos cúmulos. Para estas moléculas se consideraron configura-

ciones de equilibrio lineales y triangulares.

Con el modelo algebraico para moléculas de tres cúmulos, se reprodujeron los potenciales moleculares y se encontraron algunas restricciones para los valores permitidos de los parámetros del Hamiltoniano.

Con las restricciones para los parámetros del Hamiltoniano se obtuvieron espectros característicos para moléculas de tres núcleos. Los espectros característicos de estas moléculas dependen del tipo de configuración geométrica de equilibrio que se ha considerado.

SUMMARY.

In this work we present a phenomenological algebraic model for nuclear molecules with two and three nuclei. This model takes into account the inner structures of the nuclei.

For the case of nuclear molecules with two clusters the Hamiltonian of the model has a $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4) \supset SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes SU_R(3)$ dynamical symmetry.

We also obtain the geometrical potential associated with the algebraic Hamiltonian applying a geometrical mapping with coherent states. The relation between the parameter of the coherent state and the relative distance of the clusters was deduced.

The algebraic model was applied to the molecular system $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, the molecular spectrum of this system was reproduced fitting the parameters of the model and the geometrical potential associated with this parameters was obtained. In this case the geometrical potential and the double-folding potential show a similar behavior in the proximities of the potential minima.

Following the inverse procedure i.e. if we first reproduce some general characteristics of the molecular potential with the geometrical potential associated with the Hamiltonian and then we try to obtain the values of the parameters of the Hamiltonian, some restrictions for this parameters were obtained.

Some typical molecular spectra were obtained with the allowed values of the Hamiltonian parameters. For the nuclear molecule $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ for some of this allowed values the molecular spectrum of this system was reproduced. For the case of the hypothetical nuclear molecule $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ we also obtained some typical molecular spectra.

This last procedure is very important for nuclear molecules for which there is no experimental data of their molecular spectrum. Because if we know the double-folding potential it is possible to obtain typical energy spectra obtaining the parameters of the model by reproducing these potentials.

For the case of nuclear molecules with three clusters we present an extension of the two cluster model considered before. For these molecules linear and triangular equilibrium configurations were considered.

With the algebraic model for three cluster molecules some typical energy spectra were obtained by reproducing their double-folding potential obtaining the allowed values for the parameters of the Hamiltonian.

The molecular spectra obtained show different characteristics depending on the equi-

librium configuration that was considered.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN.

Desde el descubrimiento de las moléculas nucleares de dos cúmulos observadas por primera vez en el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ [1], no ha sido posible realizar un estudio detallado de la estructura de los espectros energéticos de estos sistemas, debido a que poseen una vida media extremadamente corta, que resulta ser del orden de 10^{-21} s [2].

Para entender las causas que dan origen a la formación de las moléculas nucleares se han desarrollado diversos modelos teóricos, algunos de estos reproducen muchos de los resultados experimentales reportados en la literatura [2].

Estos modelos pueden clasificarse en tres diferentes clases; modelos colectivos, modelos microscópicos y modelos fenomenológicos algebraicos.

En los últimos años, una serie de experimentos en la fisión espontánea del ^{252}Cf ; han sugerido la posible existencia de un nuevo tipo de moléculas nucleares con una vida media larga [3, 4]. Estas moléculas están formadas por tres núcleos; dos núcleos pesados y uno ligero. La configuración molecular identificada en estos experimentos es: $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$. Debido a su larga vida media (del orden de 10^{-13} s) este nuevo tipo de moléculas nucleares ofrece la posibilidad de estudiar un área totalmente nueva en la física nuclear, relacionada con la espectroscopía molecular-nuclear y de esta manera tener la posibilidad de estudiar de forma muy amplia, la estructura de los espectros de energía de estos sistemas tan novedosos. El estudio de este tipo de moléculas de larga vida media, formadas por núcleos pesados también podría aportar información sobre los procesos físicos que tienen lugar en la formación de los núcleos superpesados [2, 5].

En el estudio de estas novedosas moléculas nucleares de tres núcleos se han desarrollado varios modelos para la descripción de las mismas. Los primeros modelos elaborados para estudiar moléculas nucleares de tres cúmulos fueron de tipo geométrico [6, 7].

En los modelos geométricos para moléculas trinucleares la suposición básica fue que el sistema en su estado base se encuentra en una configuración lineal, en donde los ejes de simetría de los tres núcleos están completamente alineados a lo largo del eje molecular z. En los modelos geométricos inicialmente sólo se consideraron las oscilaciones pequeñas alrededor de esta configuración de equilibrio.

En los trabajos posteriores [8] también se pudieron describir moléculas nucleares en una configuración en donde los cúmulos forman un triángulo en su configuración de equilibrio. Sin embargo a diferencia de los primeros modelos geométricos [6, 7], en este modelo geométrico sólo se consideró una molécula nuclear sin tomar en cuenta la estructura interna de los fragmentos (como puede ser por ejemplo la deformación de los cúmulos). Considerar la estructura interna de los núcleos en los modelos geométricos en configuraciones triangulares presenta grandes dificultades que hacen que los cálculos numéricos resulten muy largos y complicados [8].

Posteriormente, basados en modelos algebraicos desarrollados para bariones [9, 10], se elaboró un modelo para moléculas nucleares considerando cada núcleo de la molécula trinuclear con masas diferentes [11, 12]. Este modelo sólo describe la excitación orbital entre cúmulos, de nuevo sin considerar la estructura interna de los núcleos.

Sin embargo, este modelo algebraico predice una fuerte interacción de tipo Coriolis [13] y que a excepción de la banda base, resulta en que todas las bandas moleculares excitadas no presentan una estructura rotacional, de manera contraria a los resultados de los modelos geométricos; en donde se observa una clara separación en la escala de energías de las bandas vibracionales y las bandas rotacionales, siendo estas últimas considerablemente menores en energía que las vibracionales.

Basados en el gran éxito de los modelos algebraicos [14, 15, 16] para describir el espectro de excitaciones colectivas de los núcleos a bajas energías, en este trabajo se presenta **un modelo algebraico para moléculas nucleares de tres cúmulos tomando en consideración la estructura interna de los núcleos**. El propósito de este modelo es investigar los efectos más importantes de la estructura interna de los núcleos, en el espectro energético de la molécula.

La ventaja de considerar un modelo algebraico para este tipo de moléculas, es que estos modelos permiten describir una configuración triangular **con estructura interna de los núcleos constituyentes**, que es muy difícil de obtener con un modelo geométrico.

Con el propósito de investigar las principales características de los espectros de energía para moléculas nucleares de tres cúmulos, en este trabajo de investigación se desarrolló un modelo algebraico considerando, en el Hamiltoniano, interacciones diferentes a las consideradas en modelos algebraicos anteriores. Se determinan los parámetros del Hamiltoniano al reproducir los potenciales internucleares calculados mediante el método de "doble-convolución", con los potenciales que se obtienen del mapeo geométrico del Hamiltoniano algebraico.

Los objetivos que se plantean en este trabajo para la descripción de moléculas nucleares de tres cúmulos son los siguientes:

- Obtener características generales de los espectros de energía de moléculas nucleares de tres núcleos.

- Proponer un posible Hamiltoniano algebraico para moléculas nucleares con estructura interna.
- Establecer la conexión del Hamiltoniano con el potencial internuclear.
- Cuando el modelo considera el caso de moléculas nucleares de dos núcleos, aplicarlo a moléculas nucleares conocidas ($^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$) para comparar los resultados del modelo con los existentes en la literatura.
- Reproducir los potenciales internucleares de las moléculas calculados por el método de " doble-convolución ", partiendo del potencial mapeado del Hamiltoniano algebraico.

Siguiendo el procedimiento inverso:

- Obtener los parámetros del Hamiltoniano algebraico del modelo (o restricciones para los mismos) partiendo de los potenciales internucleares (importante para moléculas nucleares potenciales donde aún no hay información del espectro).
- Obtener los espectros de energía de las moléculas nucleares $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ con los parámetros del Hamiltoniano obtenidos de los potenciales internucleares.

La tesis que aquí se presenta se divide en cinco capítulos:

En el capítulo 2 se presenta una breve revisión de los modelos teóricos existentes para la descripción de las moléculas nucleares de dos cúmulos, así como una introducción de los primeros trabajos realizados en el estudio de las moléculas nucleares con tres cúmulos.

En el capítulo 3 se presenta con todo detalle la estructura general de los modelos algebraicos existentes; para describir el movimiento relativo de los núcleos constituyentes de la molécula nuclear y la estructura interna de los mismos. En este capítulo se presenta una propuesta de modelo algebraico para la descripción de moléculas de dos cúmulos con estructura interna, que puede aplicarse de manera satisfactoria, para reproducir las resonancias moleculares del sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$. También se aplicó el modelo a la posible molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, para la que se pudo reproducir con este modelo el potencial molecular entre los núcleos para diferentes orientaciones relativas de los mismos, partiendo del potencial molecular que resulta del mapeo geométrico del Hamiltoniano del modelo.

En el capítulo 4 se presenta la extensión del modelo algebraico para el caso de moléculas nucleares con tres cúmulos. Aquí se consideran configuraciones lineales y triangulares tomando en cuenta las posibles estructuras internas de los núcleos que constituyen a la molécula nuclear. Aplicando este modelo a la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$, se han obtenido los potenciales internucleares para las coordenadas relativas del problema.

Las características generales de los espectros de energía obtenidos para estas moléculas de tres cúmulos, muestran un comportamiento semejante a los espectros de las moléculas atómicas, donde los espectros vibracional y rotacional, de la molécula nuclear, se encuentran en escalas de energía muy diferentes.

El capítulo 5 contiene la discusión de los resultados obtenidos en estos modelos algebraicos y las conclusiones de este trabajo de investigación, así como las perspectivas de futuros trabajos en esta novedosa área de estudio.

Capítulo 2

MOLÉCULAS NUCLEARES.

2.1. Moléculas nucleares con dos cúmulos

Las moléculas nucleares de dos cúmulos, son sistemas cuánticos que consisten de dos núcleos ligados entre sí por su superficie mediante un potencial cuasi-molecular [2].

Microscópicamente puede entenderse a estos sistemas como una configuración nuclear donde los nucleones más externos de ambos núcleos se mueven alrededor de los centros de ambos núcleos, manteniendo al sistema en un estado ligado, de manera análoga a los enlaces covalentes atómicos en las moléculas atómicas [2].

Las moléculas nucleares fueron observadas por primera vez por Bromley et.al. [1], a principios de la década de los 60's del siglo pasado, al estudiar la sección de dispersión en las colisiones de $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ en donde descubrieron un conjunto de resonancias, notablemente angostas por encima de la barrera coulombiana. Éstas no eran esperadas para este tipo de sistemas.

Las resonancias observadas en el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ presentan una anchura característica de aproximadamente 100 keV . Para resonancias con estas anchuras características, su tiempo de vida media promedio resulta ser mayor a 10^{-21} s , como resulta al considerar la relación de indeterminación de Heisenberg:

$$\Gamma\tau \approx h, \quad (2.1)$$

donde Γ representa la anchura de la resonancia y τ es la vida media del estado energético asociado.

Estas resonancias tan angostas encontradas en el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, no pueden corresponder a las resonancias del sistema compuesto (en este caso el núcleo de ^{24}Mg), porque estas últimas presentan un tiempo de vida promedio de aproximadamente 10^{-16} s [2], por lo que este tipo de resonancias nucleares de vida media menor, se han asociado con un nuevo tipo de configuración nuclear denominado moléculas nucleares.

El tiempo de vida media de estas moléculas nucleares es sólo suficiente para que una vez formada la molécula nuclear, cada uno de los núcleos de ^{12}C (por ejemplo) de medio

giro o máximo un giro completo alrededor del otro núcleo de ^{12}C , antes de que ambos núcleos vuelvan a separarse.

En la figura 2.1 se muestra de manera esquemática del proceso de formación y separación de estas moléculas nucleares.

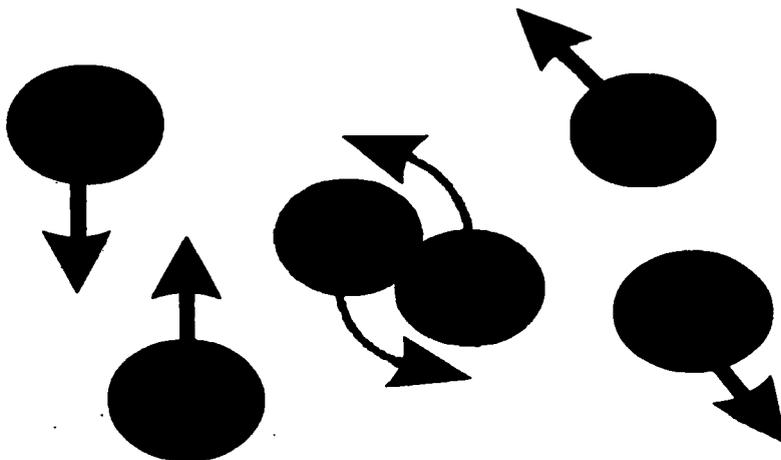


Figura 2.1: Esquema del proceso de formación y separación de las moléculas nucleares de dos cúmulos ligeros, debido a la corta vida media de estas moléculas, los núcleos que las forman sólo alcanzan a dar medio giro o máximo un giro alrededor uno del otro.

En la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, también se han realizado experimentos para observar las resonancias del sistema por debajo de la barrera coulombiana, debido a que la sección de dispersión a bajas energías en el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ es fundamental en astrofísica, donde esta reacción es de gran relevancia en la etapa del carbón en la nucleosíntesis, así como en el estudio del origen de los elementos dentro de la evolución estelar. En estos experimentos se encontraron varias resonancias moleculares en el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ para energías considerablemente menores a la de la barrera coulombiana.

Las moléculas nucleares han sido identificadas a través de sus resonancias moleculares características, estos estados moleculares pueden ser de tipo cuasi-ligado o virtuales

dependiendo del tiempo de vida media del sistema.

Los estados moleculares se presentan en "paquetes", *i. e.* el potencial entre los núcleos presenta uno o más mínimos. Los núcleos en este potencial presentan captura y excitaciones durante su movimiento relativo.

El potencial internuclear presenta algunas similitudes con los potenciales de las moléculas atómicas. Un ejemplo es el hecho de que el mínimo en el potencial molecular en el caso nuclear se origina debido al traslape de algunos orbitales de los nucleones de valencia de ambos núcleos que se encuentran en un potencial de dos centros, resultando en una disminución de la energía total del sistema. De manera análoga al efecto de ligadura de los electrones de valencia en el caso de las moléculas atómicas [17]. Sin embargo las moléculas nucleares son considerablemente más complejas que las moléculas atómicas, debido principalmente a dos causas [2]:

La primera es la interacción fuerte entre los nucleones. Así, muchos de ellos toman parte en las interacciones internucleares, que generalmente dependen del traslape y fragmentación de los subsistemas. También, debido al tipo de interacción entre los nucleones, al aumentar la distancia relativa entre los centros de masa de los dos núcleos, la estructura molecular del sistema se desvanece rápidamente.

La otra causa de la dificultad para la descripción de las moléculas nucleares, es que para el sistema nuclear existen muchos canales de reacción abiertos. En particular en estos sistemas están presentes grados de libertad individuales y colectivos, haciendo imposible una descripción que considere a todos ellos en conjunto.

Por lo anterior, es necesario introducir algunas simplificaciones y aproximaciones, como es considerar un potencial absorbente para describir la estructura y dinámica de las moléculas nucleares.

Las estructuras moleculares nucleares pueden caracterizarse mediante las siguientes propiedades:

a) Las resonancias moleculares se encuentran en la región del espectro continuo del núcleo compuesto y pueden describirse términos de configuraciones simples de los dos núcleos. Estas resonancias se originan debido a que el estado molecular está atrapado dentro de un mínimo del potencial internuclear.

b) El decaimiento de la molécula nuclear puede describirse en función de la coordenada relativa entre los núcleos.

c) El decaimiento de los estados nucleares a estados más complejos del núcleo compuesto está obstaculizado en gran medida, porque para estos estados la probabilidad de decaimiento es pequeña. Esta probabilidad está determinada por la densidad de estados del compuesto con energía E^* donde se presentan las resonancias moleculares.

Los estados moleculares desempeñan el papel de un tipo de estados intermedios en la teoría de las reacciones nucleares [2].

Las propiedades anteriores de las moléculas nucleares permiten realizar una descripción teórica de éstas en dos etapas consecutivas:

i) El acoplamiento de los estados moleculares con los estados del núcleo compuesto

pueden ignorarse y se selecciona una configuración simple, de los dos cúmulos, para construir los estados moleculares.

ii) Posteriormente, estos estados moleculares pueden acoplarse con los estados del sistema compuesto. Este acoplamiento puede describirse de manera efectiva mediante la introducción de un potencial imaginario absorbente [18].

Las configuraciones moleculares pueden observarse únicamente si estos sistemas no son destruidos por una absorción fuerte del sistema hacia la formación del sistema compuesto.

El hecho de que esta absorción tenue sólo se presente en un grupo pequeño de sistemas nucleares, como son las moléculas nucleares: $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, $^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$, $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$, $^{16}\text{O}+^{24}\text{Mg}$, $^{16}\text{O}+^{28}\text{Si}$ y $^{28}\text{Si}+^{28}\text{Si}$ sólo se ha entendido parcialmente y de manera cualitativa.

Otro ejemplo de una posible combinación de núcleos formando una molécula nuclear es el sistema $^{238}\text{U}+^{238}\text{U}$, que en teoría puede llegar a formarse [19, 20, 21].

También un tipo de radioactividad que consiste en la emisión de iones pesados como pueden ser ^{12}C , ^{24}Ne , $^{28,30}\text{Mg}$ y ^{32}Si , predicha teóricamente [22] y observada experimentalmente [23] puede considerarse como otra faceta especial de las moléculas nucleares que tiene lugar en los procesos de fisión.

En la época en que las moléculas nucleares se observaron por primera vez, principalmente en los sistemas de núcleos ligeros e.g. $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ y $^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$, se pensó que las resonancias observadas en estos sistemas podrían explicarse de manera sencilla. También se esperaba que las moléculas nucleares fueran un fenómeno aislado que se presentaba sólo en unos cuantos sistemas, desapareciendo conforme aumenta la complejidad de la estructura de los núcleos.

Sin embargo, un entendimiento teórico completo de estos sistemas aún no se ha alcanzado y muchas otras moléculas nucleares han sido observadas [24], como es el caso de los sistemas $^{24}\text{Mg}+^{24}\text{Mg}$ y $^{28}\text{Si}+^{28}\text{Si}$.

Las moléculas nucleares parecen ser un fenómeno bastante más general de lo que originalmente se había pensado, que puede presentarse en un gran número de combinaciones nucleares.

2.2. Modelos teóricos para las moléculas nucleares con dos cúmulos.

Desde el descubrimiento de las moléculas nucleares, se han elaborado muchos y muy diversos modelos teóricos que pueden describirlas, y que permiten entender los procesos físicos básicos que tienen lugar en la formación y evolución dinámica de estos sistemas nucleares.

Los modelos teóricos existentes para el estudio de las moléculas nucleares pueden dividirse en tres tipos: colectivos, microscópicos y algebraicos. A continuación describimos los aspectos más importantes de algunos de estos modelos, sin entrar en demasiados

detalles. Una presentación muy completa e introductoria sobre moléculas nucleares y de los modelos para éstas, puede encontrarse en el libro de Greiner *et. al.*, [2].

2.2.1. Modelos colectivos

Un primer paso muy significativo hacia la construcción de un modelo de moléculas nucleares, fue la introducción del *modelo de doble resonancia* [25], aplicado en la descripción de las resonancias observadas en iones pesados y en los estados moleculares de núcleos ligeros. En este modelo se introduce el mecanismo de doble resonancia, como un mecanismo de excitación efectiva para las configuraciones moleculares de larga vida media.

En la figura 2.2 se ilustra esquemáticamente este mecanismo. En esta figura, los dos núcleos, como un sólo sistema, se encuentran en un estado con energía E^* por encima de la barrera coulombiana, en el potencial molecular como función de la separación entre los núcleos.

Mediante la interacción nuclear entre ambos núcleos, este sistema es atrapado por un instante en un estado resonante arriba de la barrera coulombiana. Si el espectro energético del sistema formado por los dos núcleos en conjunto presenta una resonancia por debajo de la misma barrera y la diferencia de energías, entre ambos estados, es igual a alguna energía de excitación de uno de los núcleos o con la suma de las energías de excitación de los dos núcleos, entonces el sistema puede decaer a este estado excitado, localizado por debajo de la barrera coulombiana, disminuyendo así la probabilidad de que el sistema decaiga en sus constituyentes aislados y en consecuencia se incrementa la vida media del sistema de ambos núcleos ligados. Es mediante este proceso que se considera que la molécula nuclear se ha formado.

El modelo de la doble resonancia se ha aplicado para interpretar las diferentes estructuras intermedias que se presentan en la función de excitación por arriba de la barrera coulombiana, como resultado de la excitación inelástica de los estados cuasi-moleculares dentro del potencial molecular.

Utilizando este modelo en el estudio de las moléculas nucleares, se han obtenido resultados cualitativamente razonables y en algunos casos hasta cuantitativos, de las funciones de excitación para la dispersión elástica. También se han reproducido algunos aspectos generales de las secciones de dispersión inelástica de estos sistemas moleculares.

En este modelo, el sistema puede decaer del estado molecular nuevamente al estado de energía E^* mediante un proceso similar al que dio origen a la molécula nuclear pero en dirección inversa. El decaimiento también puede ocurrir mediante otro tipo de procesos, liberando la energía de ligadura de la molécula en uno o ambos núcleos. La molécula nuclear también puede decaer mediante transferencia de uno o más nucleones a uno de los dos núcleos.

En otro proceso de decaimiento, que puede presentarse, la molécula decae a estados excitados del sistema compuesto dando origen a una fusión parcial o completa de los

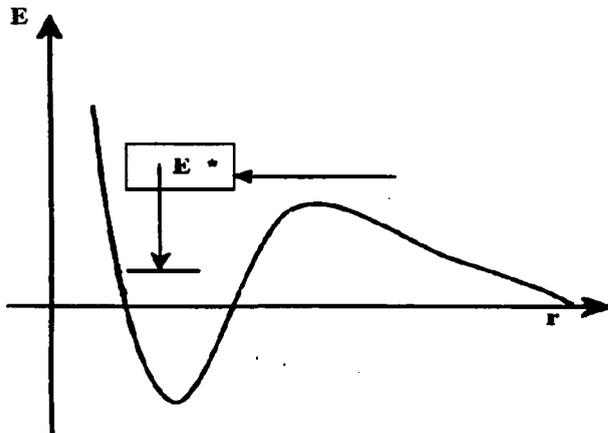


Figura 2.2: Diagrama del mecanismo de doble resonancia para la formación de las moléculas nucleares de dos cúmulos. En la figura se muestra un canal elástico para una energía E^* que al desexcitarse decae a un estado ligado dentro del potencial internuclear.

núcleos iniciales.

En el caso en que ambos núcleos mantienen su identidad pero al menos uno de ellos se excita, el proceso de decaimiento recibe el nombre de canal cuasi-elástico.

Otro modelo similar al del mecanismo de doble resonancia, es el modelo de traslape de bandas [26, 27], en este modelo las bandas rotacionales excitadas, con los momentos angulares intrínsecos y orbital alineados, presentan un traslape con la banda molecular elástica de manera que el traslape de estas bandas resulta en un acoplamiento muy fuerte entre los canales de entrada y un canal inelástico de salida determinado, generando una estructura de resonancias en las secciones de dispersión elástica e inelástica a una energía igual a la del traslape de las bandas.

En las cercanías de este punto de traslape entre ambas bandas, donde se satisface la condición de doble resonancia, la mezcla entre bandas es máxima, dando origen a las estructuras moleculares observadas. Este modelo se ha aplicado exitosamente para

reproducir una gran cantidad de información experimental de las resonancias presentes en las secciones de dispersión [28] y de fusión [29] del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, así como los resultados para la dispersión inelástica y elástica en los sistemas $^{12}\text{C}+^{16}\text{O}$ [30] y $^{16}\text{O}+^{16}\text{O}$ [27, 31].

Al considerar los datos experimentales de muchas resonancias moleculares de las diferentes funciones de excitación, fue posible determinar la existencia de una correlación entre la densidad de estados del sistema precompuesto y la posibilidad de formar una molécula nuclear [32].

Estas observaciones condujeron a otro avance importante en el desarrollo de los modelos teóricos, para dar una descripción más detallada de los procesos que dan origen a la formación de las moléculas nucleares, introduciendo el concepto de la ventana "molecular" (canales moleculares) [33], donde, en la región de excitaciones moleculares, la densidad de estados del núcleo precompuesto es extremadamente baja. Como la densidad de estados es proporcional a la intensidad de absorción del sistema, también el potencial absorbente imaginario resultará pequeño. Por lo tanto existe una pequeña ventana (la ventana molecular), en donde se puede observar el fenómeno molecular; esta ventana molecular presenta una dependencia en el momento angular de los estados moleculares y en consecuencia el potencial imaginario absorbente podría depender del momento angular.

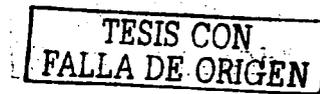
Dentro de los modelos colectivos propuestos para moléculas nucleares, existen algunos modelos [34] que poseen soluciones analíticas y que reproducen de manera muy aproximada las resonancias moleculares del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$. En estos modelos se considera que el acoplamiento entre los momentos angulares del movimiento relativo y el momento angular intrínseco de los núcleos junto con el potencial imaginario absorbente, resultan en la formación de varias bandas rotacionales en las moléculas nucleares.

Utilizando el concepto de la ventana molecular fue posible ubicar a los potenciales moleculares imaginarios, como los utilizados en los primeros modelos para moléculas nucleares de Imanishi *et. al.* [18], sobre bases físicas más sólidas.

La idea de que los potenciales moleculares imaginarios dependan del momento angular fue comprobada experimentalmente por primera vez en los estudios de la distribución angular de los estados moleculares realizados por Chatwim *et. al.* [35]. Debido a esta dependencia de la densidad de estados nucleares con la energía y el momento angular, esta ventana molecular se localiza por encima de la línea de Yrast [36]. Esta característica de la ventana molecular se muestra en la figura 2.3, en donde se ha graficado la energía de la molécula nuclear como función de $I(I + 1)$ donde I es el momento angular de la molécula, en la figura también se ha indicado la línea de Yrast para la que su energía está dada por:

$$E = \frac{\hbar^2}{2\Theta} I(I + 1) \quad (2.2)$$

donde Θ es el momento de inercia del núcleo compuesto.



En la figura 2.3 la línea inferior corresponde a la línea de Yrast. Los estados moleculares pueden presentarse por encima de esta línea mientras estos no se mezclen mucho con los estados del núcleo compuesto. La mezcla de los estados moleculares, con los del núcleo compuesto, se incrementa al aumentar la energía hasta llegar a un punto donde los dos núcleos no pueden mantener su identidad. Este límite también se encuentra indicado mediante la línea recta superior de esta figura; esta línea junto con la línea de Yrast delimitan la ventana molecular.

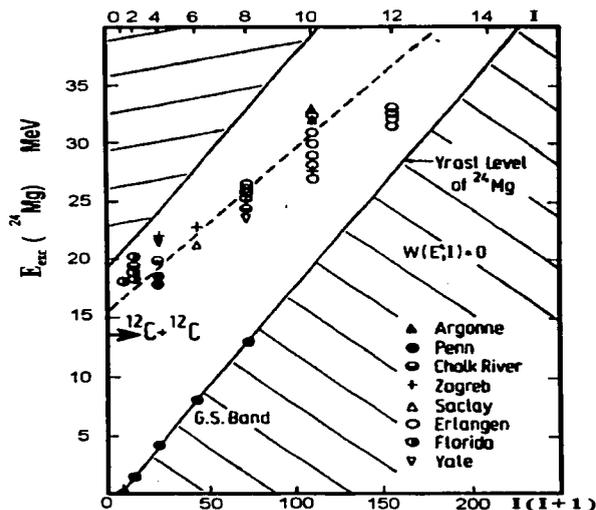


Figura 2.3: Diagrama de la ventana molecular y la línea de Yrast, en este diagrama se puede notar que las resonancias de la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ se encuentran dentro de esta ventana molecular [2].

Combinando el concepto de la ventana molecular con el de los estados cuasi-moleculares, Cindro y Pocanic [37, 38, 39] propusieron un modelo esquemático de cúmulos orbitantes. En este modelo la fragmentación de los estados rotacionales amplios, de las resonancias intermedias en otros más delgados, se debe al acoplamiento interno, *e.g.*, el acoplamiento de los modos vibracionales de la molécula con los grados de libertad

internos más importantes de los núcleos individuales.

El modelo anterior ofrece un tratamiento sistemático para las propiedades globales de las resonancias moleculares, mediante la aplicación directa de las suposiciones del modelo a diferentes sistemas de iones pesados resonantes y no resonantes.

Aunque este último modelo de cúmulos orbitantes es de tipo fenomenológico, tiene un poder predictivo sorprendente para la posición de resonancias cuasi-moleculares.

Dentro del gran número de modelos que se han construido para la descripción de moléculas nucleares también se han elaborado modelos algebraicos [40], de tipo fenomenológico, en donde se ha utilizado el álgebra generadora de espectros para describir los estados cuasi-moleculares originados en las colisiones de núcleos ligeros.

Este modelo supone que los grados de libertad del movimiento relativo son los responsables de la formación de los estados cuasi-moleculares en estos sistemas, en lugar de los grados de libertad cuadrupolares internos de cada núcleo. También este modelo considera que la estructura de los niveles de energía de una molécula nuclear es más parecida a la de las moléculas atómicas, de lo que otros modelos consideran.

Basado en este modelo algebraico, Erb y Bromley [41] pudieron ajustar las energías de las resonancias moleculares del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$. Este modelo se estudiará más detalladamente en el capítulo siguiente.

2.2.2. Modelos microscópicos

En los modelos teóricos microscópicos para la descripción de moléculas nucleares de dos cúmulos, el modelo de capas para dos centros [42, 43, 44] representa el punto de partida para cualquier descripción de esta naturaleza. Este modelo permite estudiar los enlaces moleculares de estos sistemas en términos de orbitales nucleares de una partícula.

El modelo de capas para dos centros describe los estados de los nucleones centrados alrededor de los dos núcleos en un potencial de partículas no interactuantes. En este modelo el potencial molecular efectivo, que depende de la distancia relativa entre los centros, se genera por los nucleones de ambos núcleos.

Una molécula nuclear en este modelo puede considerarse como un sistema cuántico, en donde los nucleones menos ligados a sus núcleos originales (nucleones de valencia de cada núcleo) se encuentran orbitando alrededor de ambos núcleos, moviéndose más rápido que los centros de masa de cada núcleo. Estos se mueven alrededor uno del otro de manera adiabática, como sucede en el caso de las moléculas atómicas homoplanares o covalentes como son O_2 y N_2 . Pero en el caso de las moléculas nucleares el potencial en el que se encuentran ligados los nucleones de valencia no es un potencial coulombiano atractivo sino un potencial armónico.

El modelo de capas para dos centros considera a los potenciales nucleares de ambos núcleos separados una distancia r , que corresponde a la separación entre los dos centros de masa de los núcleos, como se muestra esquemáticamente en la figura 2.4. Cuando los dos núcleos se encuentran muy separados se obtiene el límite asintótico esperado,

con los dos núcleos aislados descritos individualmente por el modelo de capas, de cada núcleo.

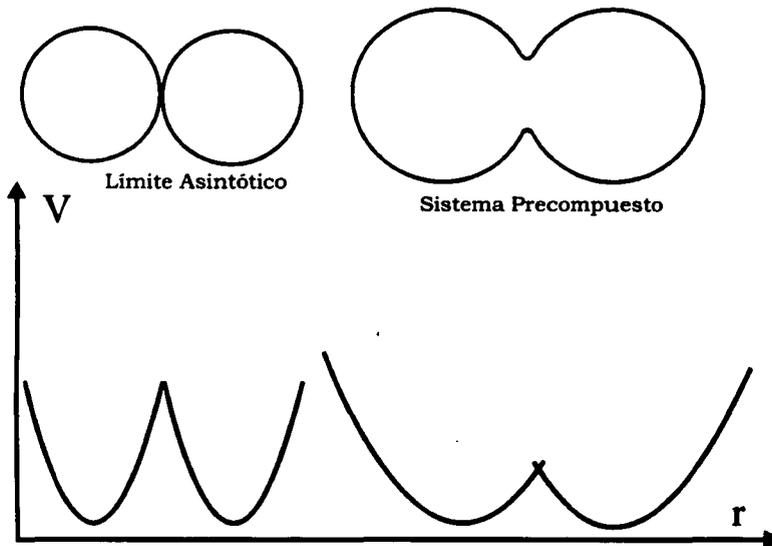


Figura 2.4: Diagrama del potencial molecular, en función de la separación entre los núcleos, en el modelo de capas para dos centros; como función de la separación entre los núcleos.

Al acercarse los núcleos entre sí, los niveles de energía de los nucleones de valencia se encuentran sujetos a las interacciones de ambos núcleos y estos nucleones compartirán los orbitales de ambos centros. Para separaciones grandes entre núcleos el traslape de los orbitales individuales de los nucleones de ambos núcleos resulta ser pequeño, que resulta en un incremento en la energía de algunos de estos orbitales y la disminución de otros [2].

Cuando en el sistema "precompuesto" los nucleones de valencia se encuentran en su mayoría en aquellos orbitales que disminuyen su energía al aproximarse los centros de los núcleos, la energía total del sistema disminuye generando un potencial molecular atractivo.

Cuando los centros continúan aproximándose entre sí, se incrementará la energía potencial molecular, resultando en un empaquetamiento de los orbitales que originalmente disminuyeron su energía.

La formación de una molécula nuclear puede no estar permitida si al aproximarse los centros de ambos núcleos, los nucleones de valencia ocupen en su mayoría los orbitales moleculares que han incrementado su energía.

La primera conclusión importante que se obtiene al aplicar este modelo a las moléculas nucleares es que los orbitales nucleares individuales específicos que ocupan, o pueden ocupar los nucleones de valencia de los núcleos individuales, desempeñan un papel central en la formación de una molécula nuclear y determinan las características específicas de las resonancias moleculares.

La estructura de los niveles de energía individuales de este modelo, en función de la separación entre los centros de masa de ambos núcleos puede observarse en la figura 2.5, donde, para el caso de la fusión completa del sistema esta estructura resulta ser muy compleja.

En general la estructura de los niveles de energía molecular también dependerá de la rapidez con que se aproximen los núcleos uno hacia el otro. Los casos límite son: el de la colisión lenta, que dará origen a un potencial adiabático (colisión adiabática) en el que se encontrarán las resonancias moleculares de mayor vida media, y el caso de las colisiones rápidas, que da origen a un potencial súbito para los canales elásticos de la colisión. En cada caso se originarán estructuras de los niveles de energía muy distintas [2].

El modelo de capas para dos centros se elaboró inicialmente para sistemas de núcleos idénticos, pero actualmente existen extensiones de este modelo al caso de núcleos diferentes [44], frecuentemente utilizados en el estudio de colisiones entre iones pesados [45].

Descripciones microscópicas más complejas, como el método generador de coordenadas basado en las funciones de onda de muchos cuerpos de los núcleos incidentes [2], se han utilizado para estudiar las resonancias moleculares de las secciones de dispersión en función de las energías incidentes.

También se han realizado cálculos microscópicos para moléculas nucleares utilizando el método de Hartree -Fock dependiente del tiempo. Estos cálculos han generado resultados que muestran la posibilidad de la formación de moléculas nucleares en varios sistemas de núcleos ligeros [46].

2.3. Moléculas nucleares de tres cúmulos

Recientemente la física de las moléculas nucleares ha retomado gran interés debido a los resultados experimentales obtenidos en la fisión espontánea del ^{252}Cf , donde se ha estudiado muy detalladamente el proceso de fisión de este núcleo en tres cúmulos, desde

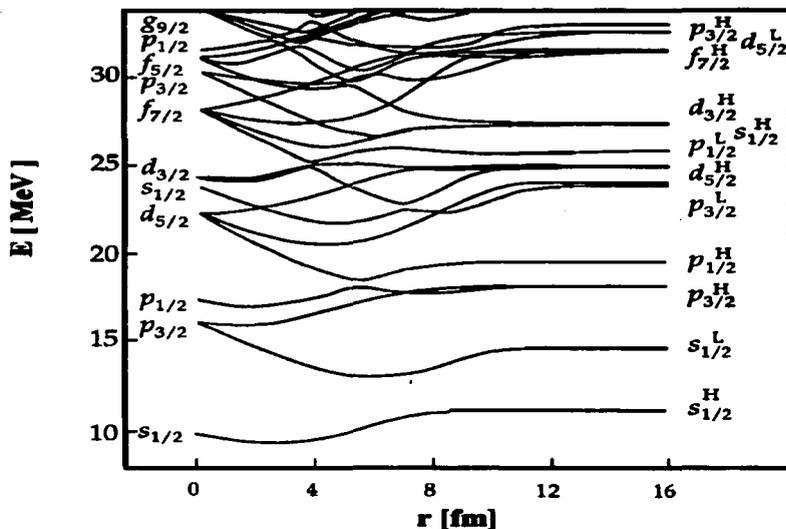


Figura 2.5: Esquema de la evolución de la estructura de bandas de la molécula nuclear de dos cúmulos, para el caso de moléculas nucleares no simétricas, en función de la separación entre los dos núcleos [2].

su estado base [3], y en donde aparentemente se observó la existencia de una molécula nuclear de tres cúmulos.

El sistema cuántico tan exótico como es una molécula nuclear de tres cúmulos, durante su tiempo de vida puede rotar y vibrar de manera análoga al caso de las moléculas atómicas [6]. En principio la radiación electromagnética γ originada en los procesos de desexcitación de los estados moleculares de la molécula puede detectarse en coincidencia con la emisión de radiación γ proveniente de los núcleos individuales, de manera que sería posible obtener evidencias concluyentes sobre la existencia de este novedoso tipo de moléculas nucleares.

En los experimentos de fisión del ^{252}Cf utilizando la Gama-Esfera [4], se observaron las coincidencias triples de radiación γ y coincidencias de doble γ acompañadas con

la emisión de partículas ligeras cargadas. Los resultados se han interpretado como una molécula nuclear de tres cúmulos. Las partículas ligeras detectadas, en detectores $\Delta E - E$, se han identificado como partículas α y núcleos de ^{10}Be y pudieron ser relacionadas con varios pares de iones pesados en estos procesos de fisión [4].

En el caso en que se detectó la emisión de ^{10}Be , este proviene de aquellos procesos de fisión triple del ^{252}Cf desde sus estado base [3]. Además, en los datos experimentales obtenidos de las triples coincidencias para estos procesos de fisión, no se observó ningún tipo de corrimiento Doppler en la transición $2_1^+ \rightarrow 0^+$ del ^{10}Be , que presenta un ligero corrimiento, menor al 1%, en el valor de la energía de transición respecto a la energía observada en ^{10}Be aislado (3368 keV). En aquellos experimentos en donde el núcleo ligero, en la fisión triple del ^{252}Cf , resulta ser el ^{10}Be , los dos núcleos pesados fueron identificados como el ^{96}Sr , y el ^{146}Ba .

La observación de esta transición electromagnética del núcleo ^{10}Be sin corrimiento Doppler, sugiere la existencia de una molécula nuclear constituida por tres núcleos con una vida media larga, del orden de algunas décimas de picosegundo $\tau \approx 10^{-13}$ s. Ésta corresponde a la vida media asociada con la transición observada del ^{10}Be , e inclusive esta molécula podría tener una vida media mayor a este periodo de tiempo, (esta vida media resulta ser mucho mayor que la vida media de las moléculas nucleares "clásicas", como la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ cuya vida resulta ser del orden de $\tau \approx 10^{-21}$ s).

Independientemente de que estos experimentos aporten evidencias concluyentes a favor de la existencia de las moléculas nucleares de tres cúmulos de vida media larga, hay argumentos físicos que sugieren la posible formación de este tipo de moléculas:

i) En la fisión del ^{252}Cf se ha observando la fisión de este núcleo en tres cúmulos, siendo la partícula α el núcleo ligero [47].

ii) Si las partículas α pueden emitirse en el proceso de fisión del ^{252}Cf , no hay razones para creer que otros iones más pesados no puedan también emitirse; como es el caso de la radiactividad de iones pesados observada con anterioridad [22, 23]. Aunque la probabilidad de emisión de iones pesados en la desintegración del ^{252}Cf es mucho menor.

iii) El núcleo ligero ^{10}Be consiste de una estructura de dos partículas α fuertemente ligadas, con dos neutrones débilmente ligados [48]. Estos últimos pueden ser ideales para efectuar los enlaces con los núcleos pesados, favoreciendo la formación de la molécula nuclear, e incrementando la vida media de la misma.

iv) Los resultados de cálculos teóricos para los potenciales moleculares asociados con los sistemas observados producen un mínimo en la energía del sistema [6], sugiriendo la posibilidad de que este tipo de moléculas pueden formarse.

Sin embargo, estos argumentos son circunstanciales y no prueban la existencia de este nuevo tipo de moléculas nucleares, debiendo esperar más resultados experimentales para confirmar su existencia.

Si la existencia de las moléculas nucleares es confirmada en el futuro, un nuevo y amplio tipo de fenómenos físicos podrá explorarse. En el caso de las moléculas nucleares "clásicas" de dos cúmulos, debido a su tiempo de vida media tan corto (10^{-21} s) no ha

sido posible realizar mediciones detalladas de espectroscopía γ . En el caso de las moléculas nucleares de tres cúmulos, con una vida media mucho mayor (10^{-13} s), existiría la posibilidad de efectuar este tipo de medidas espectroscópicas y se podría determinar la posición relativa de los núcleos que las forman. También se tendría un mayor entendimiento de los procesos de formación de las moléculas nucleares, de la estructura específica de los espectros moleculares y su posible relación con la formación de nuevos elementos superpesados.

Basados en los argumentos físicos mencionados, recientemente se han elaborado modelos teóricos para investigar los posibles tipos de movimientos colectivos que pueden presentar las moléculas nucleares de tres cúmulos y que tipo de transiciones características pueden presentarse al estudiarlas en futuros experimentos.

Dentro de los modelos teóricos desarrollados para la molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$, los modelos geométricos [6] han considerado una configuración lineal para los núcleos, donde los ejes de simetría de estos se encuentran orientados a lo largo del eje molecular z (ver figura 2.6). Desarrollos posteriores de estos modelos [7], también consideran configuraciones donde los ejes principales de los núcleos pesados presentan ángulos de inclinación (θ), pequeños respecto al eje molecular. En todos estos modelos se considera que el núcleo ligero se localiza en medio de los dos núcleos pesados y que estos pueden deformarse. También se consideran las vibraciones β y γ de los núcleos individuales.

Los diferentes tipos de movimientos que consideran estos modelos geométricos son: el de mariposa, la rotación de la molécula alrededor del eje de simetría molecular, y el de "breathing", en donde la molécula se comprime y se expande en conjunto (ver figura 2.6)

Los parámetros resultantes en estos modelos se determinan de la estructura individual de cada uno de los núcleos de la molécula y de los potenciales intermoleculares entre pares de núcleos. Estos últimos son calculados mediante la técnica de "doble convolución" de las densidades nucleares, considerando una interacción nuclear del tipo $M3Y$ más la repulsión coulombiana entre núcleos [7, 49, 50, 51].

Los principales resultados de estos modelos son [5]:

a) Exceptuando la banda rotacional del estado base, no hay más bandas en un intervalo de aproximadamente 1 MeV por encima de la banda vibracional base.

b) Los estados rotacionales de estas bandas vibratoriales se encuentran muy comprimidas, reflejándose en el hecho de que la separación entre los estados rotacionales de una misma banda es del orden de keV, debido (en parte) a que el momento de inercia de la molécula resulta ser muy grande.

c) Los primeros estados excitados para vibraciones de tipo "mariposa" se encuentran a energías muy por encima del estado base (del orden de 2 MeV). Este comportamiento es algo diferente al caso de las moléculas de dos cúmulos, donde la separación en energía entre este tipo de bandas resulta ser menor de 1 MeV.

d) Debido a la diferencia de masas de los núcleos pesados, las funciones de onda con

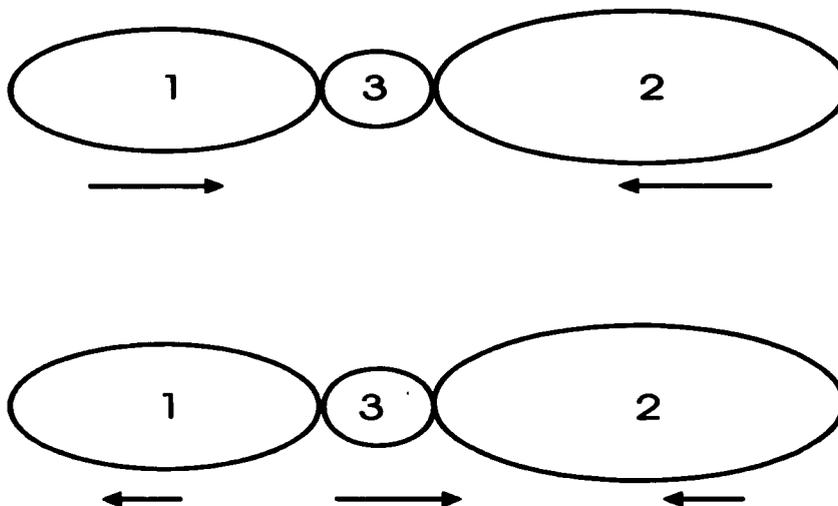


Figura 2.6: Diagrama de la configuración lineal de una molécula nuclear de tres cúmulos, en donde se indican algunos de los movimientos relativos que pueden efectuar los núcleos.

paridad positiva y negativa presentan una degeneración, exceptuando los estados 0^+ .

e) Dentro de las bandas rotacionales existen alternadamente estados de paridad positiva y negativa, debido a la pérdida de cualquier tipo de simetría discreta (todos los núcleos son diferentes).

El mayor problema que presentan estos modelos geométricos es la dificultad para describir configuraciones moleculares, en las que se considere la deformación del núcleo ligero y aquellas donde el núcleo ligero se encuentra ligeramente fuera del eje molecular z , dando origen a una configuración triangular para este tipo de moléculas.

Las configuraciones triangulares para estas moléculas resultan tener cierta importancia, porque para el caso de partículas sin estructura interna (partículas tipo α), los cálculos teóricos que consideran todos los núcleos esféricos, muestran que este sistema tiene su mínimo en el potencial molecular para una configuración triangular [8].

Debido a estas dificultades para describir las configuraciones triangulares en estas

moléculas trinucleares, e inspirados en trabajos previos para la descripción de la estructura bariónica [9]. Recientemente se han elaborado modelos algebraicos fenomenológicos que pueden superar estas dificultades. Los movimientos relativos de los cúmulos en este modelo se describen mediante un grupo $U(7)$ para las coordenadas de Jacobi del sistema.

La ventaja de estos modelos es la gran facilidad con que es posible describir sistemas complejos, que requerirían procedimientos muy complicados desde el punto de vista de la descripción geométrica. También es posible estudiar los posibles límites de las simetrías dinámicas, que tienen expresiones analíticas para los espectros de energía de los Hamiltonianos resultantes.

En estos modelos también se han relacionado los parámetros del Hamiltoniano con las constantes de rigidez de los potenciales geométricos [13]. Sin embargo, los modelos algebraicos anteriores no toman en consideración la estructura interna de los cúmulos individuales.

En el caso de una molécula nuclear de tres cúmulos en una configuración lineal, se ha encontrado teóricamente [6, 7, 13] que las contribuciones dominantes en el espectro energético del sistema provienen del movimiento relativo de los núcleos y la estructura interna de estos contribuirá en menor grado al espectro energético. Sin embargo, es necesario estudiar los efectos de la estructura interna de los núcleos en la estructura de las moléculas nucleares en configuraciones triangulares.

Como veremos más adelante, incluir la estructura interna de los cúmulos en los modelos algebraicos puede efectuarse de manera directa sin las dificultades encontradas en los modelos geométricos.

En el capítulo siguiente estudiaremos con más detalle los aspectos generales de los modelos algebraicos para moléculas nucleares y construiremos un modelo algebraico para moléculas nucleares de dos cúmulos, tomando en consideración la estructura interna de los núcleos individuales mediante el modelo de bosones interactuantes ($IBM-1$) [14, 15] y una extensión de este modelo, para el caso de núcleos ligeros, el modelo $IBM-4$ [16].

También se presenta la técnica de los estados coherentes, que se empleará para relacionar los parámetros del Hamiltoniano del modelo algebraico con las constantes de interacción de los potenciales moleculares.

Capítulo 3

MODELOS ALGEBRAICOS PARA MOLÉCULAS NUCLEARES.

A continuación se presentan los primeros modelos algebraicos diseñados para la descripción de moléculas nucleares con dos cúmulos [40, 41], para esto, es necesario revisar los modelos algebraicos del grupo $U(4)$ con sus dos cadenas de simetría dinámica: el límite vibracional $U(3)$ y el límite deformado $SO(4)$. También presentamos los aspectos más generales del modelo de bosones interactuantes en su simetría dinámica $SU(3)$, que nuestro modelo considera para moléculas nucleares de dos cúmulos. Al final de este capítulo presentamos nuestra propuesta de extensión de los modelos algebraicos para moléculas nucleares de dos cúmulos tomando en consideración la estructura interna de los cúmulos y se aplica al espectro molecular del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

3.1. Modelos vibrónico y de bosones interactuantes (IBM).

3.1.1. El modelo vibrónico $U(4)$

El modelo vibrónico puede expresarse en términos del álgebra de Lie del grupo $U(4)$. El álgebra de un grupo $U(4)$ puede desarrollarse en términos de cuatro operadores de creación bosónicos y sus correspondientes cuatro operadores de aniquilación b_i^\dagger, b_i ($i = 1, \dots, 4$), donde se pueden imponer algunas restricciones adicionales para estos operadores a partir de las consideraciones físicas del problema que se esté estudiando.

En el caso de los modelos algebraicos basados en el álgebra del grupo $U(4)$ como aquellos desarrollados para los niveles vibracionales de moléculas diatómicas [15, 52, 53], en ausencia de campos electromagnéticos externos, los estados de este tipo de moléculas poseen valores de momento angular (L) y paridad (π) bien definidos. Estas restricciones requieren que un modelo algebraico con una simetría $U(4)$, para este tipo de moléculas,

considere un Hamiltoniano que resulte invariante ante rotaciones y reflexiones. Para esto tenemos que introducir operadores bosónicos con propiedades bien definidas bajos estas dos transformaciones.

Para obtener operadores que tomen en cuenta las propiedades anteriores, es necesario considerar operadores tensoriales esféricos con paridad bien definida. Sin embargo, para seleccionar las propiedades específicas de los operadores b_i^\dagger , b_i , es necesario elegir el tipo de problema que deseamos estudiar. En nuestro caso, deseamos un modelo que describa las vibraciones y rotaciones de moléculas de dos núcleos, en donde los grados de libertad del movimiento relativo de los constituyentes juegan un papel central en la descripción de estas propiedades para las moléculas nucleares.

Los grados de libertad del movimiento relativo corresponden a operadores esféricos de rango 1 ($L = 1$) y paridad negativa ($\pi = -1$), por lo que es natural considerar operadores bosónicos que posean este tipo de propiedades de transformación ante rotaciones y reflexiones. Lo anterior conduce a considerar una construcción del álgebra del grupo $U(4)$ en términos de un operador vectorial p_m^\dagger (de rango 1) con sus tres componentes ($m = -1, 0, 1$) y un operador escalar s^\dagger (de rango 0). Los operadores p_m^\dagger y p_m se utilizan para describir los grados de libertad dipolares, sin embargo el contenido físico de los operadores bosónicos $s^\dagger(s)$ no es muy claro. Su introducción sólo está justificada de manera fenomenológica, como una forma de considerar interacciones entre estados bosónicos con diferente número de bosones tipo p [52, 53].

Los operadores p y s satisfacen las reglas usuales de conmutación para operadores bosónicos i.e:

$$\begin{aligned} [p_m^\dagger, p_{m'}] &= \delta_{m,m'}, & [s^\dagger, s] &= 1 \\ [p_m^\dagger, s] &= 0, & [s^\dagger, p_m] &= 0 \end{aligned} \quad (3.1)$$

Las propiedades de rotación y reflexión de los operadores p_m^\dagger y s^\dagger pueden resumirse considerando su transformación bajo rotaciones $\hat{R}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$, dadas por los ángulos de Euler θ_i .

$$\begin{aligned} \hat{R}^{-1} p_m^\dagger \hat{R} &= \sum_{m'} D_{m'm}^{(1)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) p_{m'}^\dagger \\ \hat{R}^{-1} s^\dagger \hat{R} &= s^\dagger \end{aligned} \quad (3.2)$$

donde $D_{m'm}^{(1)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ son las matrices de Wigner con momento angular $L = 1$. También se pueden considerar la transformación de los operadores p_m^\dagger y s^\dagger ante reflexiones \hat{P} :

$$\begin{aligned} \hat{P}^{-1} p_m^\dagger \hat{P} &= -p_m^\dagger \\ \hat{P}^{-1} s^\dagger \hat{P} &= s^\dagger \end{aligned} \quad (3.3)$$

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Los operadores de aniquilación p_m y s en general no se transforman como operadores tensoriales esféricos, pero los operadores:

$$\begin{aligned}\bar{p}_m &= (-)^{1+m} p_{-m} \\ \bar{s} &= s,\end{aligned}\quad (3.4)$$

satisfacen las mismas propiedades de transformación que los operadores p_m^\dagger y s^\dagger [15].

Como la invariancia rotacional es de singular importancia en los modelos algebraicos para moléculas de dos cúmulos, resulta conveniente escribir los generadores del grupo $U(4)$ de acuerdo a sus propiedades como operadores tensoriales esféricos. Para esto utilizamos los coeficientes de Clebsch-Gordan, para acoplar un operador p_m^\dagger o s^\dagger con otro operador \bar{p}_m o \bar{s} a un operador bilineal con momento angular λ y proyección μ , definido de la siguiente manera:

$$B_\mu^{(\lambda)}(l, l') = [b_l^\dagger \otimes \bar{b}_{l'}]_\mu^{(\lambda)} = \sum_{m, m'} \langle lm, l'm' | \lambda \mu \rangle b_{lm}^\dagger \bar{b}_{l'm'} \quad , \quad (3.5)$$

con $b_{lm}^\dagger = (p_m^\dagger \circ s^\dagger)$ y $\bar{b}_{lm} = (\bar{p}_m \circ \bar{s})$. Los operadores $B_\mu^{(\lambda)}(l, l')$ definen los 16 generadores del grupo $U(4)$.

En el contexto del modelo vibrónico sólo tienen interés las subálgebras del grupo $U(4)$, que contienen el álgebra del momento angular del grupo $SO(3)$. Los generadores de esta algebra están dados por los siguientes operadores:

$$L_\mu = \sqrt{2} B_\mu^{(1)}(1, 1) = \sqrt{2} [p^\dagger \otimes \bar{p}]_\mu^{(1)} \quad . \quad (3.6)$$

Para considerar únicamente aquellas subálgebras del grupo $U(4)$ invariantes ante rotaciones, es necesario encontrar todas las álgebras G que contengan al grupo de rotaciones $SO(3)$. Es decir, aquellas álgebras que cumplan con la condición:

$$U(4) \supset G \supset SO(3). \quad (3.7)$$

Una posible algebra con las características anteriores puede obtenerse eliminando aquellos generadores del grupo $U(4)$ que contengan a los operadores de creación y aniquilación de tipo s , los generadores restantes:

$$\begin{aligned}\hat{n}_p &= \sqrt{3} [p^\dagger \otimes \bar{p}]_0^{(0)} \\ \hat{L}_\mu &= \sqrt{2} [p^\dagger \otimes \bar{p}]_\mu^{(1)} \\ \hat{Q}_\mu &= [p^\dagger \otimes \bar{p}]_\mu^{(2)} \quad ,\end{aligned}\quad (3.8)$$

forman un álgebra del grupo $U(3)$, de manera que puede establecerse la siguiente cadena de álgebras:

$$U(4) \supset U(3) \supset SO(3), \quad (3.9)$$

donde debemos considerar la representación totalmente simétrica del grupo $U(4)$, debido a que se trata de un sistema bosónico. Esta representación se denota por: $[N]$, donde N es el número total de bosones de tipo p y s . El grupo $U(3)$ posee también una representación totalmente simétrica $[n_p]$, donde n_p es el número total de bosones de tipo p . El grupo $SO(3)$ del momento angular también contiene la proyección del momento angular M_L a lo largo del eje z (asociado al subgrupo $SO(2)$).

Los sistemas que presentan una simetría dinámica dada por la cadena de álgebras (3.9), están clasificados por los estados $[[N]n_pLM_L)$.

Existe una segunda cadena de grupos que satisface la condición (3.7) y que consta de los operadores:

$$\begin{aligned} \hat{L}_\mu &= \sqrt{2} [p^\dagger \otimes \bar{p}]_\mu^{(1)} \\ \hat{D}_\mu &= i [p^\dagger \otimes \bar{s} + s^\dagger \otimes \bar{p}]_\mu^{(1)} \end{aligned} \quad (3.10)$$

Estos operadores resultan ser los generadores del grupo $SO(4)$, de manera que la cadena de grupos:

$$U(4) \supset SO(4) \supset SO(3). \quad (3.11)$$

satisface las condiciones deseadas para la construcción de un modelo vibrónico.

Los sistemas que presentan una simetría dinámica dada por la cadena de álgebras (3.11), están clasificados por los estados $[[N] \omega LM_L)$, donde ω está asociado con los valores propios del operador de Casimir de segundo orden del grupo $SO(4)$.

El Hamiltoniano más general del modelo vibrónico del grupo $U(4)$ que resulta invariante ante rotaciones, reflexiones y que conserva el número total de bosones puede expresarse en términos de los operadores (3.8) y (3.10) mediante la siguiente expresión [15]:

$$\hat{H} = \epsilon_0 + \chi_1 \hat{n}_p + \chi_2 \hat{n}_p^2 + \chi_3 (\hat{L}^2 + \hat{D}^2) + a \hat{L}^2 \quad (3.12)$$

donde ϵ_0 es una constante aditiva.

El Hamiltoniano anterior se puede reducir al Hamiltoniano asociado con alguna de las dos cadenas dinámicas anteriores, para casos especiales en donde algunos de los parámetros del Hamiltoniano se anulen. Por ejemplo, para el caso de la cadena dinámica (3.9) un Hamiltoniano que presente este tipo de simetría puede expresarse de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \epsilon_0 + \chi_1 \hat{n}_p + \chi_2 \hat{n}_p^2 + a \hat{L}^2, \quad (3.13)$$

este Hamiltoniano posee una expresión analítica para sus energías, dadas por:

FALLA DE ORIGEN

$$E(n_p, L) = \epsilon_0 + \chi_1 n_p + \chi_2 n_p^2 + aL(L+1) \quad (3.14)$$

Estas energías están dadas en términos de los valores permitidos para n_p y L dados por

$$\begin{aligned} n_p &= 0, 1, \dots, N \\ L &= n_p, n_p - 2, \dots, 1 \quad \text{ó} \quad 0. \end{aligned} \quad (3.15)$$

En el caso de la cadena dinámica (3.11), el Hamiltoniano más general con este tipo de simetría puede expresarse de la siguiente manera:

$$\hat{H} = \epsilon_0 + \chi_3(\hat{L}^2 + \hat{D}^2) + a\hat{L}^2 \quad (3.16)$$

con energías dadas por la siguiente expresión:

$$E(\omega, L) = \epsilon_0 + \chi_3\omega(\omega+2) + aL(L+1) \quad (3.17)$$

donde los valores permitidos para ω y L estarán dados por:

$$\begin{aligned} \omega &= N, N-2, \dots, 1 \quad \text{ó} \quad 0 \\ L &= 0, 1, \dots, \omega. \end{aligned} \quad (3.18)$$

El modelo vibrónico permitirá, en el caso de moléculas nucleares, describir las excitaciones de las moléculas nucleares de dos cúmulos debidas a los grados de libertad del movimiento relativo de los centros de masa de los cúmulos, mientras que el modelo de bosones interactuantes, del que a continuación consideraremos los aspectos más generales, permitirá describir las excitaciones colectivas de los núcleos individuales.

3.1.2. Modelo de Bosones Interactuantes (IBM)

La suposición básica del modelo algebraico de bosones interactuantes es que los estados colectivos de bajas energías en los núcleos se encuentran dominados por las excitaciones de los protones y neutrones de valencia de los núcleos [14, 15]. También en el modelo de bosones interactuantes se supone que las configuraciones para los nucleones de valencia, que corresponden a pares de nucleones idénticos acoplados a momento angular 0 o 2, resultan ser las más determinantes de la estructura de los espectros nucleares colectivos a bajas energías. En el IBM estos pares se consideran como bosones con momento angular $L = 0$ descritos por los operadores $s^\dagger(s)$, llamados bosones tipo s , y bosones con momento angular $L = 2$, $d_m^\dagger(d_m)$, llamados bosones tipo d .

En el modelo, el número de protones y neutrones de valencia (N), acoplados en pares está dado respecto a la capa cerrada más cercana. Es decir, si menos de la mitad de la

banda de valencia se encuentra ocupada, el número de pares acoplados corresponderá a pares de partículas, mientras que si más de la mitad de la banda se encuentra ocupada, el número de bosones N estará dado por el número de huecos en la banda de valencia.

En la versión más sencilla del IBM (IBM-1) no se considera ninguna distinción entre protones y neutrones. Esta aproximación resulta ser adecuada para núcleos pesados donde la formación de pares de protón - neutrón es poco probable, debido a que los protones y neutrones se encuentran ocupando diferentes capas de valencia. Sin embargo, para el caso de núcleos ligeros, tanto los protones como los neutrones de valencia se encuentran en la misma capa y en este caso resulta necesario considerar bosones correspondientes a pares de neutrón - neutrón, protón - protón y de protón - neutrón por separado. En este caso el modelo de bosones interactuantes debe extenderse a su versión denominada (IBM-4), como se verá más adelante cuando se consideran los núcleos de carbono ^{12}C en la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

Para describir los estados colectivos de los núcleos en el IBM se introducen los bosones de creación y aniquilación s^\dagger, d_μ^\dagger (s, d_μ) donde $\mu = -2, -1, 0, 1, 2$, estos operadores satisfacen las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [d_\mu^\dagger, d_{\mu'}] &= \delta_{\mu, \mu'}, & [s^\dagger, s] &= 1 \\ [d_\mu^\dagger, s] &= 0, & [s^\dagger, d_\mu] &= 0 \end{aligned} \quad (3.19)$$

De manera análoga al modelo vibrónico $U(4)$, es conveniente utilizar los operadores \tilde{d}_μ, \tilde{s} definidos de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \tilde{d}_\mu &= (-)^{2+m} d_{-\mu} \\ \tilde{s} &= s, \end{aligned} \quad (3.20)$$

y que nuevamente se transforman como operadores esféricos al igual que los operadores s^\dagger y d_μ^\dagger .

Los 36 generadores $B_\mu^{(\lambda)}(L, L')$ que pueden obtenerse con los diferentes acoplamientos de los operadores d y s dan origen a una álgebra de un grupo $U(6)$.

El Hamiltoniano más general dentro del IBM que resulta invariante ante rotaciones y reflexiones, y que conserva el número total de bosones para interacciones de uno y dos cuerpos, puede expresarse de la siguiente manera [14, 15, 16]:

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_s \hat{n}_s + \epsilon_d \hat{n}_d + \sum_{L=0,2,4} \frac{1}{2} (2L+1)^{\frac{1}{2}} \chi_L \left[[d^\dagger \otimes d^\dagger]^{(L)} \otimes [\bar{d} \otimes \bar{d}]^{(L)} \right]^{(0)} \\
 & + \frac{\tilde{v}_2}{\sqrt{2}} \left\{ \left[[d^\dagger \otimes d^\dagger]^{(2)} \otimes [\bar{d} \otimes \bar{s}]^{(2)} \right]^{(0)} + \left[[d^\dagger \otimes s^\dagger]^{(2)} \otimes [\bar{d} \otimes \bar{d}]^{(2)} \right]^{(0)} \right\} \\
 & + \frac{\tilde{v}_0}{\sqrt{2}} \left\{ \left[[d^\dagger \otimes d^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{s} \otimes \bar{s}]^{(0)} \right]^{(0)} + \left[[s^\dagger \otimes s^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{d} \otimes \bar{d}]^{(0)} \right]^{(0)} \right\} \\
 & + u_2 \left[[d^\dagger \otimes s^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{d} \otimes \bar{s}]^{(0)} \right]^{(0)} + u_0 \left[[s^\dagger \otimes s^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{s} \otimes \bar{s}]^{(0)} \right]^{(0)}, \quad (3.21)
 \end{aligned}$$

donde el número total de bosones $N = n_d + n_s$ se conserva.

Para este modelo existen tres cadenas dinámicas que contienen el momento angular y que están dadas por las siguientes cadenas de grupos:

$$\begin{aligned}
 U(6) \supset U(5) \supset SO(5) & \supset SO(3) \quad (I) \\
 & U(6) \supset SU(3) \supset SO(3) \quad (II) \\
 U(6) \supset SO(6) \supset SO(5) & \supset SO(3) \quad (III)
 \end{aligned} \quad (3.22)$$

Un estudio muy detallado de estas cadenas dinámicas puede encontrarse en los libros de modelos algebraicos [14, 15, 16]. Aquí únicamente nos concentraremos en estudiar brevemente la cadena dinámica (II), debido a que esta cadena es la que se considera más adelante en el modelo para moléculas nucleares para describir la estructura interna de núcleos bien deformados, que es el caso que nuestro modelo intenta describir en una primera etapa.

Para la cadena dinámica (II) los generadores del grupo $SU(3)$ están dados por:

$$\begin{aligned}
 \hat{L}_\mu &= \sqrt{10} [d^\dagger \otimes \bar{d}]_\mu^{(1)} \\
 \hat{Q}_\mu &= [d_\mu^\dagger \bar{s} + s^\dagger \bar{d}_\mu] \pm \sqrt{\frac{7}{4}} [d^\dagger \otimes \bar{d}]_\mu^{(2)}
 \end{aligned} \quad (3.23)$$

En general los estados del grupo $U(6)$ están dados por la representación totalmente simétrica de este grupo para N bosones. La clasificación posterior de los estados con una simetría $SU(3)$ estará dada de acuerdo a las representaciones irreducibles de este grupo, que están caracterizadas por dos números cuánticos (λ, μ) . Los valores de (λ, μ) contenidos en la representación $[N]$ están dados por [14, 15, 16]:

$$\begin{aligned}
 (\lambda, \mu) &= (2N, 0), (2N - 4, 2), \dots, \left\{ \begin{array}{l} (N, 0) \\ (2, N - 1) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{si } N \text{ es par} \\ \text{si } N \text{ es impar} \end{array} \right\} \\
 \text{y } &(2N - 6, 0), (2N - 10, 2), \dots, \left\{ \begin{array}{l} (0, N - 3) \\ (2, N - 3) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{si } N \text{ es par} \\ \text{si } N \text{ es impar} \end{array} \right\} \\
 \text{y } &(2N - 12, 0), (2N - 16, 2), \dots, \left\{ \begin{array}{l} (0, N - 6) \\ (2, N - 3) \end{array} \right\} \left\{ \begin{array}{l} \text{si } N \text{ es par} \\ \text{si } N \text{ es impar} \end{array} \right\} \\
 &\dots
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

Para obtener las representaciones irreducibles del grupo $SO(3)$ dadas por el momento angular L , la reducción del grupo $SU(3)$ al grupo $SO(3)$ no es simplemente reducible. Esto quiere decir que es necesario considerar una etiqueta adicional K [54]. De esta forma, los valores de L contenidos en la representación (λ, μ) del grupo $SU(3)$ estarán dados por:

$$L = K, K + 1, \dots, K + \text{máx}\{\lambda, \mu\} \quad , \tag{3.25}$$

donde:

$$K = \text{mín}\{\lambda, \mu\}, \text{mín}\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 1 \quad \text{ó} \quad 0 \quad , \tag{3.26}$$

exceptuando el caso donde $K = 0$ para el que los valores permitidos de L estarán dados por:

$$L = \text{máx}\{\lambda, \mu\}, \text{máx}\{\lambda, \mu\} - 2, \dots, 1 \quad \text{ó} \quad 0. \tag{3.27}$$

Por lo que los estados correspondientes a una simetría perteneciente a la cadena dinámica (II) de la ecuación (3.22) estarán dados por:

$$|[N] (\lambda, \mu) K L \rangle \tag{3.28}$$

Finalmente, consideremos los operadores de Casimir de segundo orden del grupo $SU(3)$ y del grupo $SO(3)$, mismos que juegan un papel muy importante en la construcción de nuestro modelo para moléculas nucleares.

El operador de Casimir de segundo orden del grupo $SU(3)$ estará dado por:

$$C_2(SU(3)) = 2Q^2 + \frac{3}{4}L^2 \quad , \tag{3.29}$$

y el operador de Casimir de segundo orden del grupo $SO(3)$ será el momento angular al cuadrado:

$$C_2(SO(3)) = L^2 \tag{3.30}$$

donde:

$$\begin{aligned}
 Q^2 &= \sum_{\mu=-2}^2 (-1)^\mu Q_\mu Q_{-\mu} \\
 L^2 &= \sum_{\mu=-1}^1 (-1)^\mu L_\mu L_{-\mu} \quad , \quad (3.31)
 \end{aligned}$$

son los productos internos de los operadores Q y L . El Hamiltoniano asociado con esta simetría dinámica puede expresarse en términos de los operadores de Casimir (3.29) y (3.30) de la siguiente manera:

$$\hat{H}^{(11)} = \epsilon_0 + \chi_1 C_2(SU(3)) + \chi_2 C_2(SO(3)) \quad , \quad (3.32)$$

este Hamiltoniano posee la siguiente expresión analítica para sus energías:

$$E(\lambda, \mu, L) = \epsilon_0 + \chi_1 (\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu)) + \chi_2 L(L + 1) \quad . \quad (3.33)$$

Antes de presentar la propuesta de un posible Hamiltoniano para moléculas nucleares con estructura interna, revisaremos brevemente un modelo algebraico para moléculas nucleares que no considera la estructura interna de los núcleos y que sirve de referencia para entender, de manera clara, la forma en que nuestro modelo introduce las estructuras internas de los núcleos en el Hamiltoniano algebraico del modelo.

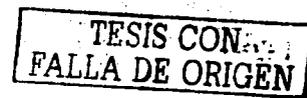
3.2. Modelo algebraico para moléculas nucleares sin estructura interna.

El primer modelo algebraico para moléculas nucleares propuesto por Iachello [40], considera que la estructura de los niveles de energía de las moléculas nucleares está dominada por la contribución de los grados de libertad dipolares, de momento angular $L = 1$ y paridad negativa (1^-), de manera totalmente análoga al caso de las moléculas diatómicas [17], donde la variable fundamental resulta ser el vector \vec{r} , que representa la distancia entre los dos átomos (núcleos en nuestro caso).

En este modelo se dejan de lado los grados de libertad cuadrupolares (2^+) de los núcleos individuales.

También se considera que el comportamiento de los espectros cuasi-moleculares en el caso nuclear puede caracterizarse por dos números cuánticos, el vibracional ν y el momento angular L . Para el caso atómico, una descripción empírica de los niveles de energía puede darse por la expresión de Dunham [55]:

$$E(\nu, L) = \sum_{i,j} Y_{ij} \left[\nu + \frac{1}{2} \right]^i [L(L + 1)]^j \quad , \quad (3.34)$$



donde los coeficientes Y_{ij} contienen información sobre el momento de inercia y la frecuencia vibracional de la molécula y deben de ajustarse a partir de los datos experimentales.

Sin embargo, las bandas vibro-rotacionales en (3.34) no tienen una energía de corte por lo que no es posible obtener información sobre la energía de disociación molecular y, en consecuencia, no se pueden conocer las configuraciones responsables de la formación de la molécula.

Una descripción más fundamental se obtiene construyendo los potenciales interatómicos $V(\vec{r})$ (en nuestro caso internucleares) y resolviendo la ecuación de Schrödinger correspondiente.

Generalmente $V(\vec{r})$ no es conocido y debe desarrollarse en serie alrededor de su mínimo \vec{r}_0 . Uno de los desarrollos más utilizado es el oscilador anarmónico, representado por la siguiente expansión:

$$V(r) = V_0 + A(r - r_0)^2 + B(r - r_0)^3 + C(r - r_0)^4, \quad (3.35)$$

donde los coeficientes tienen que determinarse experimentalmente.

Sin embargo, en el caso nuclear la determinación de los coeficientes se complica considerablemente porque las configuraciones nucleares no son estables, pero sobre todo porque las interacciones que dan origen a la formación de los enlaces moleculares nucleares no se conocen con exactitud.

Como una alternativa, para superar las dificultades que aparecen para determinar los coeficientes del potencial internuclear, se propuso un tratamiento algebraico que presenta dos ventajas muy importantes. Por una parte, el planteamiento del problema resulta ser muy simple, y por otra, el tratamiento que da al problema molecular resulta ser muy detallado.

El modelo algebraico para las moléculas nucleares que trataremos a continuación, está basado en el resultado de que un espectro vibro-rotacional en n dimensiones puede generarse aplicando las álgebras de Lie de los grupos unitarios en $n + 1$ dimensiones [14, 15, 16]. Como vimos en la sección anterior, la aplicación de estos métodos al espectro cuadrupolar ($n = 5$) resulta en una descripción muy detallada de los estados de baja energía de los núcleos con un número par de protones y de neutrones (núcleos *par - par*). Por esta razón, parece ser adecuado aplicar esta técnica al espectro dipolar ($n = 3$) para describir el espectro molecular y cuasi-molecular de este tipo de sistemas.

En el caso $n = 3$, el grupo apropiado resulta ser el grupo $U(4)$ y por sencillez se considera un Hamiltoniano lineal y cuadrático en los generadores de $U(4)$, siendo el más general de este tipo:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$\begin{aligned}
 H = & \epsilon_s s^\dagger s + \epsilon_p p^\dagger \cdot \bar{p} + \sum_{L=0,2} \frac{1}{2} (2L+1)^{\frac{1}{2}} c_L \left[[p^\dagger \otimes p^\dagger]^{(L)} \otimes [\bar{p} \otimes \bar{p}]^{(L)} \right]^{(0)} \\
 & + u_0 \left[[s^\dagger \otimes s^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{s} \otimes \bar{s}]^{(0)} \right]^{(0)} + u_1 \left[[p^\dagger \otimes \bar{s}]^{(1)} \otimes [s^\dagger \otimes \bar{p}]^{(1)} \right]^{(0)} \\
 & + u_2 \left[\left[[p^\dagger \otimes p^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{s} \otimes \bar{s}]^{(0)} \right]^{(0)} + \left[[s^\dagger \otimes s^\dagger]^{(0)} \otimes [\bar{p} \otimes \bar{p}]^{(0)} \right]^{(0)} \right] . \quad (3.36)
 \end{aligned}$$

El espectro de energía puede obtenerse diagonalizando H en el espacio de la representación irreducible totalmente simétrica de dimensión N ($[N]$) del grupo $U(4)$. Recordemos que el número cuántico N juega el papel de corte en el espectro energético del grupo unitario que estamos considerando.

En este modelo algebraico para casos especiales (simetrías dinámicas del Hamiltoniano), es posible obtener soluciones analíticas para el espectro energético. En el caso del grupo $U(4)$, como vimos en la sección anterior, sólo existen dos cadenas dinámicas que contienen al grupo de rotaciones:

$$\begin{aligned}
 U(4) & \supset SO(4) \supset SO(3) \supset SO(2) \quad (I) \\
 U(4) & \supset U(3) \supset SO(3) \supset SO(2) \quad (II)
 \end{aligned} \quad (3.37)$$

En el modelo se considera un Hamiltoniano con una simetría dinámica $SO(4)$ (cadena dinámica I), donde el Hamiltoniano H se puede expresar como función de los operadores de Casimir de esta cadena dinámica mediante la siguiente expresión [40]:

$$H = \chi_R^{(1)} \left[\frac{1}{4} (s^\dagger s^\dagger - \mathbf{p}^\dagger \cdot \mathbf{p}^\dagger) (\bar{s} \bar{s} - \mathbf{p} \cdot \mathbf{p}) \right] + \chi_R^{(2)} [L_R^2], \quad (3.38)$$

donde L_R^2 es el momento angular del movimiento relativo de los núcleos. Los estados propios del Hamiltoniano se clasifican de manera única mediante el conjunto de números: N , ω que clasifica los estados del grupo $SO(4)$ ($\omega = N, N-2, \dots, 1$ ó 0), el momento angular L ($L = \omega, \omega-1, \dots, 1, 0$) y su proyección M .

El espectro más general correspondiente a esta simetría dinámica resulta ser

$$E(N, \omega, L, M) = \frac{\chi_R^{(1)}}{4} (N - \omega) (N + \omega + 2) + \chi_R^{(2)} (L(L+1)) , \quad (3.39)$$

donde $\chi_R^{(1)}$ y $\chi_R^{(2)}$ son constantes del modelo que deben determinarse experimentalmente. La estructura del espectro resultante se muestra en la figura 3.1.

Se puede mostrar fácilmente que este espectro es análogo a espectros de moléculas diatómicas dados por la relación empírica de Dunham [17]. Introduciendo el número cuántico vibracional $\nu = \frac{(N-\omega)}{2}$, esta semejanza se hace evidente:

$$E(N, \nu, L) = -D + a\left(\nu + \frac{1}{2}\right) - b\left(\nu + \frac{1}{2}\right)^2 + c(L(L+1)) , \quad (3.40)$$

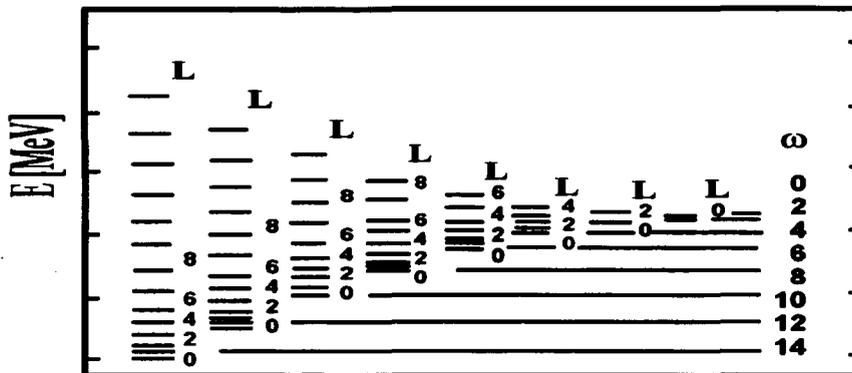


Figura 3.1: Espectro característico, correspondiente al Hamiltoniano algebraico correspondiente al límite $SO(4)$ del modelo algebraico $U(4)$.

donde:

$$\begin{aligned}
 D &= \chi_R^{(1)} \frac{(2N+3)}{4} \\
 a &= \chi_R^{(1)} (N+2) \\
 b &= \chi_R^{(1)} \\
 c &= \chi_R^{(2)}.
 \end{aligned}$$

Comparando (3.40) con (3.34) se observa que la simetría dinámica $SO(4)$ corresponde a la expansión empírica del espectro de energía con sólo tres coeficientes Y_{10} , Y_{20} y Y_{01} .

Erb y Bromley [41] aplicaron este modelo a las resonancias moleculares del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ (tabla 3.1), y pudieron reproducir de forma muy aproximada los resultados experimentales, como se puede ver en la figura 3.2. Los valores numéricos de los parámetros del Hamiltoniano (3.38) están dados por:

$$\begin{aligned}
 N &= 16 \\
 \chi_R^{(1)} &= 80 \text{ keV} \\
 \chi_R^{(2)} &= 76 \text{ keV}
 \end{aligned} \tag{3.41}$$

En este modelo únicamente los valores pares de momento angular y paridad positiva están permitidos para un sistema de bosones idénticos. En el ajuste de los datos expe-

rimentales mostrados en la figura 3.2, el valor obtenido para el parámetro rotacional, $\chi_R^2 = 0.076 \text{ MeV}$, corresponde a una configuración de equilibrio con los dos núcleos apenas en contacto formando una pequeña mancuerna. El momento de inercia obtenido de este parámetro implica una separación de equilibrio entre núcleos de aproximadamente 6.75 fm . Como veremos más adelante, esto corresponde a un mínimo en el potencial molecular para una distancia algo mayor a la obtenida en el cálculo de "doble-convolución", para el potencial molecular del sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$.

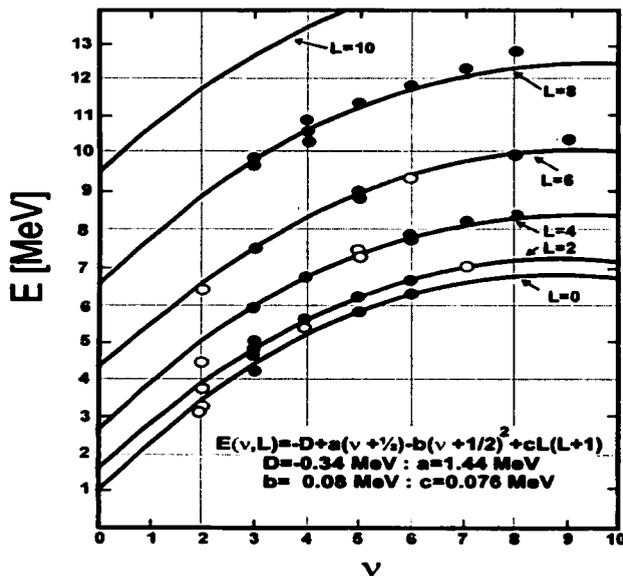


Figura 3.2: Comparación de los espectros de energía experimental y teórico del modelo algebraico $\text{SO}(4)$, para la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$. En esta gráfica los valores teóricos están representados por las curvas sólidas y los valores experimentales por los puntos negros y blancos, donde la paridad de estos últimos no se ha establecido completamente de manera experimental [41].

| $L = 0$ | $L = 2$ | $L = 4$ | $L = 6$ | $L = 8$ |
|---------|---------|---------|---------|---------|
| 3.17 | 3.75 | 4.46 | 6.49 | 9.65 |
| 3.35 | 4.62 | 5.77 | 7.55 | 9.84 |
| 4.25 | 4.88 | 5.96 | 8.86 | 10.30 |
| 5.80 | 5.00 | 6.85 | 9.05 | 10.63 |
| 5.97 | 5.37 | 7.30 | 9.33 | 10.90 |
| | 5.64 | 7.45 | 9.98 | 11.20 |
| | 5.80 | 7.71 | 10.45 | 11.38 |
| | 6.01 | 7.90 | | 11.90 |
| | 6.25 | 8.26 | | 12.36 |
| | 6.63 | 8.45 | | 12.98 |
| | 7.05 | | | |

Tabla 3.1: Valores experimentales de los niveles de energía, en unidades de MeV, de la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, dadas en las Refs. [24, 41], clasificados por su momento angular.

3.2.1. Relación del Hamiltoniano algebraico con el potencial geométrico.

En el estudio de los modelos algebraicos es importante conocer el contenido geométrico de los Hamiltonianos asociados con estos modelos. Para poder establecer la conexión entre los modelos algebraicos y la parte geométrica es necesario considerar estados coherentes que permitan expresar el potencial molecular nuclear, asociado al Hamiltoniano algebraico, como función de la separación relativa entre los núcleos (r).

El estado coherente más general asociado con el grupo $U(4)$ puede expresarse en la siguiente forma [56, 57]:

$$|N, \delta_1 \rangle = \frac{(\hat{s}^\dagger + \delta_1 \cdot \hat{\mathbf{p}}^\dagger)^N}{\sqrt{N!(1 + \delta_1^2)^N}} |0 \rangle, \quad (3.42)$$

donde:

$$\delta_1^2 = \delta_1 \cdot \delta_1 = \sum_{\mu=1}^3 (-1)^\mu \delta_{1\mu} \delta_{1-\mu}$$

y \hat{s} distingue al operador adicional de momento angular cero del modelo vibrónico $U(4)$ del otro operador s de momento angular cero, perteneciente al modelo de bosones interactuantes.

Para calcular el valor de expectación del Hamiltoniano (3.38) en el estado coherente (3.42), y expresar el potencial molecular en función de la separación \bar{r} , primero es necesario determinar la relación existente entre el parámetro δ_{1m} del estado coheren-

te (3.42) y la distancia relativa r_m . Para esto consideremos la definición del operador distancia relativa, cuantizado respecto al oscilador armónico de frecuencia angular ω_r :

$$\mathbf{r}_m = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_r}}(p_m^\dagger + p_m). \quad (3.43)$$

Debido a la introducción del corte (N) al considerar el operador bosónico adicional \hat{s} (0^+) en el espectro energético del grupo $U(4)$, el operador \mathbf{r}_m debe modificarse de manera que, el nuevo operador \mathbf{r}_m^a y el operador (3.43) tengan los mismos elementos de matriz cuando $N \rightarrow \infty$. De esta forma definimos el nuevo operador algebraico para la distancia relativa como [57]:

$$\mathbf{r}_m^a = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega_r}}(p_m^\dagger \hat{s} + \hat{s}^\dagger p_m), \quad (3.44)$$

de manera que la distancia relativa entre los núcleos estará dada por:

$$r_m = \frac{\langle \mathbf{r}_m^a \rangle}{\sqrt{\langle \hat{s}^\dagger \hat{s} \rangle}}, \quad (3.45)$$

donde se ha restado la contribución de los operadores \hat{s}^\dagger y \hat{s} dividiendo por $\sqrt{\langle \hat{s}^\dagger \hat{s} \rangle}$, donde $\langle \hat{s}^\dagger \hat{s} \rangle$ corresponde al valor esperado de este operador en el estado coherente (3.42).

Calculando el valor de expectación del operador distancia relativa algebraico (3.45) con respecto al estado coherente (3.42) obtenemos para el valor de la distancia entre los núcleos:

$$\begin{aligned} \frac{r_m}{\sqrt{2Nb}} &= \frac{\delta_{1m}}{\sqrt{(1 + \delta_1^2)}}, \\ b &= \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_r}} \end{aligned} \quad (3.46)$$

Considerando el estado coherente (3.42) y la relación entre δ_{1m} y r_m , obtenemos, para el valor de expectación del Hamiltoniano algebraico (3.38) el siguiente resultado (con $r^2 = \mathbf{r} \cdot \mathbf{r}$):

$$\langle H \rangle = V(r) = \frac{1}{4}\chi_R^{(1)}N(N-1)\left(\frac{r^2}{Nb^2} - 1\right)^2 + \chi_R^{(2)}\frac{r^2}{b^2}. \quad (3.47)$$

Es decir, podemos obtener el potencial $V(r) = \langle H \rangle$ de manera análoga a como se obtiene en el método generador de coordenadas en su aproximación gaussiana [58]. Este " potencial " geométrico presenta un mínimo para una distancia relativa r_0 entre los dos cúmulos dada por:

$$(\tau_0)^2 = Nb^2 \left(1 - \frac{2\chi_R^{(2)}}{\chi_R^{(1)}} \left(\frac{1}{N-1} \right) \right) \quad (3.48)$$

Si consideramos los valores numéricos de la ecuación (3.41), obtenemos el siguiente resultado:

$$\left(\frac{\tau_0}{b} \right)^2 = 13.97 \quad (3.49)$$

Como también sabemos que el valor para la distancia relativa de equilibrio para el sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ resulta ser $r_0 = 6.75$ fm, de acuerdo al momento de inercia asociado con el parámetro $\chi_R^{(2)} = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}$ donde μ es la masa reducida de la molécula finalmente, obtenemos:

$$b = 1.81 \text{ fm}. \quad (3.50)$$

Con este valor de b y $N = 16$ podemos estimar la frecuencia del oscilador armónico ω_r :

$$\hbar\omega_r = \frac{(\hbar c)^2}{b^2 \mu c^2} \approx 2.05 \text{ MeV}. \quad (3.51)$$

Esta frecuencia resulta ser del mismo orden de magnitud que la separación en energía entre el estado base y el primer estado vibracional excitado, para el sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ en el modelo algebraico [41]. El potencial geométrico resultante se muestra en la figura 3.3.

3.3. Modelo algebraico para moléculas nucleares con estructura interna.

El potencial molecular (3.47) presenta un mínimo para una distancia diferente de cero. Por otra parte, es necesario en un modelo para moléculas nuclear que el traslape entre núcleos sea pequeño, ya que no se toma en cuenta el principio de Pauli.

Debido a la suposición de que el traslape entre núcleos es pequeño, este tipo de modelos algebraicos sólo pueden estudiar el espectro molecular de energía de estos sistemas de dos núcleos, que por otra parte es el tipo de sistemas que estamos interesados en estudiar.

En la búsqueda de un modelo algebraico que permita describir a las moléculas nucleares con dos cúmulos, se tiene como una posibilidad la combinación de dos modelos algebraicos bien establecidos: el modelo nuclear vibrónico [14, 59, 60] y el IBM [15, 16]. Para el caso de núcleos ligeros es necesario considerar una variante del modelo IBM implementada para este tipo de núcleos, que resulta ser el modelo de bosones interactuantes en su versión 4 (IBM-4) [16, 61]. Para el caso de núcleos pesados se utiliza el IBM en su versión original. En ambos casos, se considerará un grupo de simetría $U(6)$ para

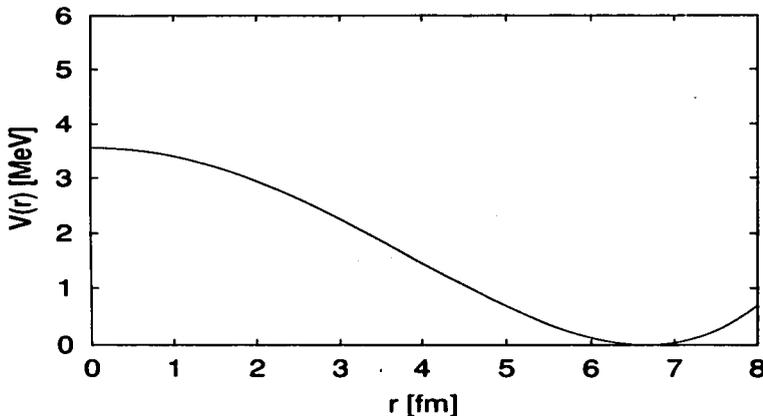


Figura 3.3: Potencial geométrico asociado con el valor de expectación del Hamiltoniano (3.38), para el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

describir los grados de libertad orbitales de los núcleos. En el modelo IBM-4 además de los pares de protones y neutrones, existe la posibilidad de la formación de pares de protón-neutrón.

Cada uno de los dos núcleos se representa por un grupo $U(6)$, el movimiento relativo se puede describir mediante el grupo $U_R(4)$ del modelo vibrónico. El grupo de simetría G , considerado en nuestro modelo está dado por el producto directo de los grupos de simetría del modelo IBM de cada uno de los dos núcleos y el grupo $U_R(4)$ correspondiente al movimiento relativo de los mismos, $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$, donde el índice C_i señala a cada uno de los núcleos.

Existen varias cadenas posibles de los subgrupos del grupo de simetría G , cada una de las cuales corresponde a una simetría dinámica. La clasificación general de estas cadenas dinámicas puede consultarse en el Apéndice 1. Para nuestros propósitos de construir un modelo algebraico para moléculas nucleares de dos cúmulos con estructura interna, únicamente discutiremos aquí la siguiente cadena dinámica:

$$\begin{aligned}
 U(6)_{C_1} \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4) &\supset SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes SU_R(3) \supset \\
 [N_{21}] \quad [N_{22}] \quad [N] &\quad (\lambda_1, \mu_1) \quad (\lambda_2, \mu_2) \quad (n_r, 0) \\
 &\supset SU_C(3) \otimes SU_R(3) \supset SU(3) \supset SO(3) \\
 (\lambda_C, \mu_C) \rho_C \quad (n_r, 0) &\quad (\lambda, \mu) \rho \quad \kappa L \quad , \quad (3.52)
 \end{aligned}$$

donde N_{2i} es el número total de bosones en el modelo IBM, n_r es el número total de bosones del movimiento relativo, (λ_i, μ_i) corresponde a la representación del subgrupo $SU(3)$ del i -ésimo cúmulo, (λ_C, μ_C) es la representación irreducible (irrep) del grupo $SU(3)$ a la que los dos cúmulos están acoplados, y (λ, μ) es la irrep total del grupo $SU(3)$ total, L es el momento angular total; y ρ_C, ρ, κ representan las multiplicidades. El índice κ puede relacionarse, aproximadamente, con la proyección del momento angular sobre el eje z intrínseco de la molécula nuclear [62].

En el Hamiltoniano de este modelo se considera que la interacción cuadrupolar $Q \cdot Q$ del núcleo compuesto, es la interacción más importante para el caso de núcleos bien deformados. Esta interacción se expresa en términos de las interacciones cuadrupolares de cada uno de los núcleos, del movimiento relativo y de los operadores cuadrupolares $Q_i \cdot Q_j$ ($i \neq j = 1, 2$ y R), que aparecen en la cadena dinámica (3.52) para los diferentes grupos $SU(3)$.

Para el caso de sistemas simétricos debe tomarse en cuenta la condición adicional de que $(\lambda + \mu + n_r)$ tiene que ser igual a un número par [63]. En el caso de sistemas simétricos como $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, en los modelos algebraicos que no toman en consideración la estructura interna de los núcleos ($\lambda = \mu = 0$) por lo que n_r tiene que ser un número par, resultando en valores también pares de L y paridad positiva.

En el caso en que consideramos la estructura interna de los cúmulos, en general los valores finales de λ y μ pueden ser distintos de cero. Para estos casos, n_r puede ser impar y consecuentemente L impar con paridad negativa como resulta en el modelo semimicroscópico algebraico [63].

En el modelo que estamos considerando, también es posible sustituir los grupos $U_{C_i}(6)$ por los grupos microscópicos $SU_{C_i}(3)$, y en lugar de considerar un modelo fenomenológico se puede trabajar con un *Modelo Algebraico Fermiónico para Cúmulos*. Es decir, el procedimiento presentado para este modelo puede tener un amplio campo de aplicación.

El Hamiltoniano asociado a la cadena dinámica (3.52) está dado por:

$$\begin{aligned}
 H = & \chi_1 C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_2 C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_{12} C_2(SU_C(3)) + \chi_\omega n_R + \\
 & \chi_R C_2(SU_R(3)) + \chi_T C_2(SU(3)) + \\
 & \chi_N (C_2(SU_C(3)) - \langle C_2(SU_C(3)) \rangle_{\theta_0}) n_R + aL^2 + cK^2, \quad (3.53)
 \end{aligned}$$

donde los valores de los parámetros χ representan la rigidez de las diferentes interacciones cuadrupolo-cuadrupolo, L^2 es el operador de momento angular, y K^2 es el operador

introducido anteriormente [62]. Los valores propios del operador K^2 representan aproximadamente la proyección del momento angular sobre el eje de simetría intrínseco del sistema. El término proporcional al parámetro χ_N , como veremos más adelante, resulta necesario para poder reproducir los potenciales internucleares, donde $\langle C_2(SU_C(3)) \rangle$ representa el valor de expectación del operador $C_2(SU_C(3))$ en el estado coherente de los núcleos individuales.

Los operadores de Casimir de segundo orden en este Hamiltoniano son funciones de los operadores de momento angular y del operador cuadrupolar, apropiados para cada uno de los grupos involucrados. Para el operador cuadrupolar del modelo IBM tenemos la siguiente expresión.

$$Q_{IBM-i,m} = [d_{im}^\dagger \bar{s} + s^\dagger \bar{d}_{im}] \pm \sqrt{\frac{7}{4}} [d^\dagger \otimes \bar{d}]_m^{(2)}, \quad (3.54)$$

donde el signo positivo se utiliza para el caso en que se consideran núcleos oblatos y el signo negativo para el caso de núcleos prolatos. El índice i en (3.54) señala el número de cúmulo y m es la proyección sobre el eje z de este operador.

Los valores propios del Hamiltoniano (3.53) en la base definida por la cadena dinámica (3.52) está dado hasta una constante aditiva por la expresión:

$$\begin{aligned} E = & \chi_1(\lambda_1^2 + \mu_1^2 + \lambda_1\mu_1 + 3(\lambda_1 + \mu_1)) + \chi_2(\lambda_2^2 + \mu_2^2 + \lambda_2\mu_2 + 3(\lambda_2 + \mu_2)) + \\ & \chi_{12}(\lambda_C^2 + \mu_C^2 + \lambda_C\mu_C + 3(\lambda_C + \mu_C)) + \chi_\omega n_R + \chi_R(n_R^2 + 3n_R) + \\ & \chi_T(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu)) + \\ & \chi_N((\lambda_C^2 + \mu_C^2 + \lambda_C\mu_C + 3(\lambda_C + \mu_C)) - \langle C_2(SU_C(3)) \rangle_{\theta_0})n_R + \\ & + aL^2 + c\kappa^2 \end{aligned} \quad (3.55)$$

Para el caso de los parámetros χ_1 y χ_2 , estos deben determinarse considerando el espectro de energía de los núcleos individuales ajustando la separación en energía de los estados 0^+ .

El Hamiltoniano del modelo resulta ser una extensión del considerado en el modelo nuclear vibrónico con estructura interna de Daley-Iachello [59, 60], desarrollado para la descripción del espectro de núcleos pesados a bajas energías. En este caso se considera un núcleo deformado y una partícula α (esférica) mediante el Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} H = & \chi_C C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_\omega n_r \\ & + \chi_R C_2(SU_R(3)) + \chi_T C_2(SU(3)) \\ & + aL^2 \end{aligned} \quad (3.56)$$

3.4. Contenido geométrico del modelo algebraico.

Sin embargo, aún es necesario averiguar si el potencial geométrico asociado al Hamiltoniano (3.53) presenta un mínimo como función de la distancia relativa para una separación diferente de cero entre los cúmulos, como es de esperarse en un potencial molecular nuclear. Con este propósito, consideraremos el valor de expectación de este Hamiltoniano entre el estado coherente de la parte relativa y de los cúmulos individuales.

Consideremos el contenido geométrico del movimiento relativo de los núcleos. Para esto se utilizará la técnica de los estados coherentes [56, 57, 64]. Para el caso de las moléculas nucleares de dos cúmulos, es suficiente considerar el sistema de coordenadas respecto al sistema de referencia molecular, definido de manera que el eje molecular z se encuentra a lo largo del vector que conecta los centros de masa de cada núcleo (Fig. 3.4). En este sistema únicamente hay un bosón p_0 en el movimiento relativo y en consecuencia el estado coherente (3.42) puede expresarse como:

$$|N, \delta_1\rangle = \frac{(\hat{s}^\dagger + \delta_1 \cdot p_0^\dagger)^N}{\sqrt{N!(1 + \delta_1^2)^N}} |0\rangle, \quad ,$$

donde δ_1 es el parámetro de normalización de este estado coherente y que está relacionado con la distancia relativa mediante la expresión:

$$\begin{aligned} \frac{r}{\sqrt{2Nb}} &= \frac{\delta_1}{\sqrt{(1 + \delta_1^2)}}, \\ b &= \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_r}}. \end{aligned} \quad (3.57)$$

Debido a que la variable δ_1 puede tomar valores de 0 a ∞ , la distancia relativa r puede variar de 0 al valor máximo $\sqrt{2Nb}$. Para poder describir una molécula nuclear, los valores de ω_r y N deben ser tales que r varíe entre 0 y una cierta distancia, varios fermis por encima de la distancia en donde ambos núcleos se alcanzan a tocar, a lo largo del eje molecular z , definida como: $(R_{01} + R_{02})$ donde R_{0i} es el radio del cúmulo i ($i=1,2$). Lo anterior implica considerar un valor de N suficientemente grande.

Existe otra definición del parámetro del estado coherente, i.e. $|N, \delta_1\rangle \sim (\sqrt{(1 - \delta_1^2)}\hat{s}^\dagger + \delta_1 p_0^\dagger)^N |0\rangle$ [57]. Para este estado coherente la distancia relativa es directamente proporcional al parámetro δ_1 . Sin embargo, debido a la raíz cuadrada en el estado coherente, δ_1 sólo puede variar entre cero y 1, que es el resultado análogo al expresado por la ecuación (3.57), para la restricción de los valores permitidos para r .

Ahora consideremos la estructura interna de cada uno de los núcleos, descritos mediante el modelo IBM-1 (para núcleos pesados) o por el modelo IBM-4 (para núcleos ligeros). Para esto utilizaremos el siguiente estado coherente [65]:

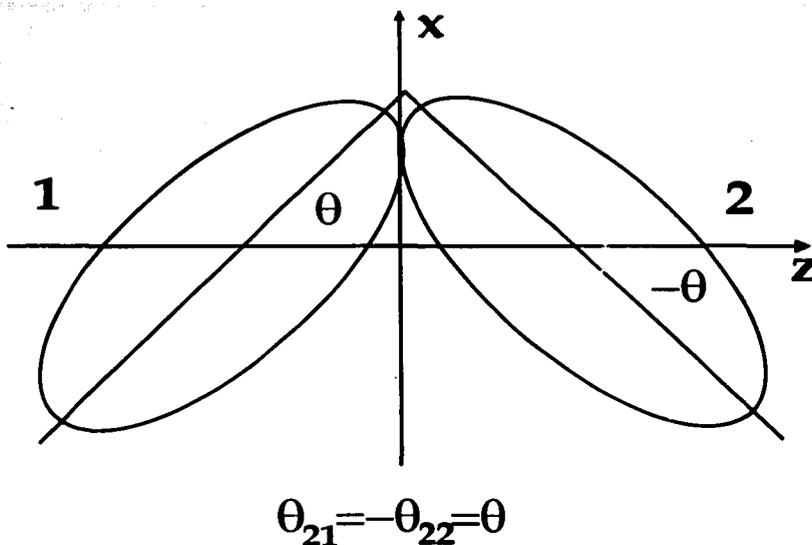


Figura 3.4: Diagrama de una molécula nuclear definida respecto al sistema de referencia intrínseco de la molécula. En este sistema el eje z conecta los dos centros de masa. Para el caso de núcleos prolatos, las líneas diagonales indican los ejes de simetría de los núcleos. Para el caso de núcleos oblatos, los ejes de simetría serán perpendiculares a estas líneas diagonales.

$$|N_{2i}; \beta_i, \theta_{2i}\rangle = \frac{(s^\dagger + \alpha_{2i} \cdot \mathbf{d}_i^\dagger)^{N_{2i}}}{\sqrt{N_{2i}!(1 + \alpha_{2i}^2)^{N_{2i}}}} |0\rangle, \quad (3.58)$$

donde $i = 1, 2$ se refiere a cada uno de los núcleos con

$$\alpha_{2i} \cdot \hat{\mathbf{d}}_i^\dagger = \sum_m \alpha_{2mi} \hat{d}_{i2m}^\dagger, \quad (3.59)$$

y $\alpha_i^2 = (\alpha_{2i} \cdot \alpha_{2i})$.

En general, los valores de los coeficientes α_{2mi} están dados por la expresión [67]:

$$\alpha_{2mi} = \sum_{m'} D_{mm'}^{(2)*}(\theta_i) a_{2mi} \quad , \quad (3.60)$$

donde en el sistema de referencia intrínseco de cada uno de los núcleos tenemos [67]:

$$\begin{aligned} a_{20i} &= \beta_i \cos \gamma_i \\ a_{2\pm 1i} &= 0 \\ a_{2\pm 2i} &= \frac{\beta_i}{\sqrt{2}} \text{sen} \gamma_i \quad . \end{aligned}$$

Si concentramos nuestra atención únicamente al caso de núcleos axialmente simétricos, es decir, $\gamma = 0$ con $\beta > 0$ para núcleos prolatos y $\beta < 0$ para núcleos oblatos, los coeficientes $\alpha_{i2\mu}$ están dados por:

$$\alpha_{2mi} = \beta_i d_{m0}^2(\theta_{2i}) \quad , \quad (3.61)$$

debido a que:

$$a_{2\mu i} = \beta_i \delta_{\mu 0} \quad . \quad (3.62)$$

Por esto, finalmente obtenemos para los coeficientes α_{2mi} , respecto al sistema molecular de referencia definido en la figura 3.4,

$$\begin{aligned} \alpha_{i20} &= \frac{1}{2} \beta_i (3 \cos^2 \theta_{2i} - 1) \\ \alpha_{i2\pm 1} &= \pm \sqrt{\frac{3}{8}} \beta_i \text{sen}(2\theta_{2i}) \\ \alpha_{i2\pm 2} &= \sqrt{\frac{3}{8}} \beta_i \text{sen}^2(\theta_{2i}) \quad , \end{aligned} \quad (3.63)$$

donde θ_{2i} es el ángulo de inclinación del eje de simetría del i -ésimo cúmulo respecto al eje molecular z (ver figura 3.4).

En la siguiente sección veremos que para el caso de núcleos ligeros, donde el modelo IBM-4 debe considerarse [16, 61], la distinción de los diferentes tipos de bosones puede evitarse para representaciones irreducibles particulares.

El estado coherente total con el que queremos calcular el valor de expectación del Hamiltoniano (3.53) está dado por el producto directo de los estados coherentes de los dos núcleos y el correspondiente al movimiento relativo de estos. Con el valor de

expectación del Hamiltoniano en este estado coherente, se obtiene el potencial molecular del sistema $V(r, \beta_1, \beta_2, \theta_{21}, \theta_{22}) = \langle H \rangle$, resultando para este potencial (este valor de expectación está calculado para el caso de $L = 0$ y $\kappa = 0$):

$$\begin{aligned}
 V = & (\chi_1 + \chi_{12} + \chi_T)[10N_1 + \frac{4N_1(N_1 - 1)\beta_1^2}{(1 + \beta_1^2)^2} [2 \pm \sqrt{2}\beta_1 + \frac{1}{4}\beta_1^2]] \\
 & + (\chi_2 + \chi_{12} + \chi_T)[10N_2 + \frac{4N_2(N_2 - 1)\beta_2^2}{(1 + \beta_2^2)^2} [2 \pm \sqrt{2}\beta_2 + \frac{1}{4}\beta_2^2]] \\
 & + (\chi_R + \chi_T)[\frac{2}{b^2}r^2 + \frac{1}{4b^4}r^4] + \chi_\omega \frac{1}{2b^2}r^2 \\
 & + (\chi_{12} + \chi_T) \frac{8N_1N_2\beta_1\beta_2}{(1 + \beta_1^2)(1 + \beta_2^2)} [1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}] \\
 & (3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1) \\
 & + \sqrt{2}\chi_T \frac{1}{b^2}r^2 \frac{N_1\beta_1}{1 + \beta_1^2} [1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}] (3\cos^2(\theta_{21}) - 1) \\
 & + \sqrt{2}\chi_T \frac{1}{b^2}r^2 \frac{N_2\beta_2}{1 + \beta_2^2} [1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}] (3\cos^2(\theta_{22}) - 1) \\
 & + \chi_N \frac{1}{b^2}r^2 \frac{4N_1N_2\beta_1\beta_2}{(1 + \beta_1^2)(1 + \beta_2^2)} [1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}] \\
 & [(3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1) - (3\cos^2(\theta_{210} - \theta_{220}) - 1)] \quad , \quad (3.64)
 \end{aligned}$$

donde el signo + (-) se refiere a núcleos prolatos (oblatos).

Nótese que para el caso de núcleos esféricos ($\beta_i = 0$, $i=1,2$) únicamente aparecen en el potencial términos proporcionales a r^2 y r^4 . En este caso obtenemos el conocido límite del oscilador anarmónico. Sin embargo, como veremos más adelante, si no consideramos la estructura interna de los núcleos, con el potencial asociado al Hamiltoniano algebraico (3.64), no podríamos considerar potenciales internucleares para diferentes ángulos de inclinación de los ejes de simetría de los núcleos respecto al eje molecular z.

Los parámetros de deformación que aparecen en el valor de expectación (3.64) son aquellos deducidos directamente del estado coherente. Aunque como se ha mostrado anteriormente por Kirson [65], estos parámetros difieren de los parámetros físicos, y están relacionados mediante un factor. Regularmente el parámetro $\beta = \beta_{IBM}$ en el modelo IBM es más grande que el parámetro de deformación $\beta_{fis.}$, por un factor de entre 3 y 5 veces. La relación aproximada entre estos parámetros está dada por [65]:

$$\beta_{fis.} = 1.18 \left(\frac{2N_{IBM}}{A} \right) \beta_{IBM} \quad (3.65)$$

3.5. Aplicaciones del modelo algebraico a los sistemas $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$

En esta sección se aplica el modelo algebraico y su contenido geométrico al estudio del sistema molecular de núcleos ligeros $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$. Mucha información experimental para su espectro se encuentra disponible en la literatura [24]. Lo anterior permitirá ajustar los parámetros del Hamiltoniano algebraico, utilizando este espectro y deducir el potencial molecular en función de la separación relativa entre los núcleos, mismo que puede compararse con el potencial molecular calculado mediante otras técnicas, e.g. cálculos de "doble-convolución" [49].

Posteriormente, también se aplica el modelo algebraico al sistema de núcleos pesados $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, que desempeña un papel primordial en la posible molécula nuclear de tres cúmulos $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ [3, 4, 47]. Para este sistema no existen datos experimentales de su espectro energético, por lo que nuestros cálculos serán una predicción para la estructura de esta molécula nuclear hipotética.

3.5.1. Molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$

El núcleo de carbón, en el que protones y neutrones de valencia se encuentran en la misma capa en el modelo de capas, debe estudiarse considerando la extensión del modelo algebraico de bosones interactuantes a estos casos, el modelo IBM-4 [16, 61]. En lugar de estudiar este modelo en detalle, a continuación aplicaremos las ideas más relevantes del mismo a la descripción del núcleo ^{12}C . Para este núcleo la estructura de grupos del modelo IBM-4 está dada por:

$$U(36) \supset U_{ST}(6) \otimes U_{sd}(6) \quad , \quad (3.66)$$

donde el grupo $U_{ST}(6)$ describe los grados de libertad de isospín (T) y de espín intrínseco (S).

Una forma de obtener los valores de T y S es mediante la reducción del grupo $U_{ST}(6)$ en sus subgrupos $SU_T(2) \otimes SU_S(2)$ de isospín y espín, utilizando el grupo intermedio $SU(4)$ del supermultiplete de Wigner para bosones:

$$U(36) \supset U_{ST}(6) \otimes U_{sd}(6) \supset SU_{ST}(4) \otimes U_{sd}(6) \supset (SU_T(2) \otimes SU_S(2)) \otimes U_{sd}(6). \quad (3.67)$$

La presencia de este grupo es de esperarse, porque los 6 tipos de bosones $T = 1 \ S = 0$ y $T = 0 \ S = 1$ pertenecen a la misma representación irreducible del grupo $SU_{ST}(4)$ y que corresponde a la irrep de 6 dimensiones $(0, 1, 0)$.

Los estados de menor energía son aquellos que corresponden a una representación simétrica de $U_{sd}(6)$. Debido a que la irrep del grupo total $U(36)$ tiene que ser simétrica,

la irrep del grupo $U_{ST}(6)$ también tiene que ser simétrica, i.e. $[N]$. Esta irrep de $U_{ST}(6)$ contiene las irreps. de $SU_{ST}(4)$, $(0, \sigma, 0)$, donde σ puede tomar los valores:

$$\sigma = N, N-2, \dots, 1, \quad \text{ó} \quad 0. \quad (3.68)$$

Los valores de T y S contenidos en la representación $(0, \sigma, 0)$ están dados por la condición:

$$T + S = \sigma, \sigma - 2, \dots, 1, \quad \text{ó} \quad 0. \quad (3.69)$$

En el caso de ^{12}C , el número de bosones correspondientes a la irrep $[N]$ del grupo $U_{sd}(6)$ resulta estar dada por $[N] = [2]$, debido a que hay dos huecos bosónicos en la capa de valencia (cuatro nucleones ausentes en esta capa). En el caso de irreps totalmente simétricas ($[N]$), el problema se reduce al caso en donde únicamente hay un tipo de bosones s y d . Este hecho es el que justifica el uso del estado coherente dado por la ecuación (3.58).

Como $N = 2$, el número cuántico σ puede tomar los valores: $\sigma = 0, 2$ y los valores de T y S correspondientes serán:

$$\begin{aligned} \sigma = 2 \quad T + S = 2 &\Rightarrow \quad T = 2, S = 0 \quad T = 1, S = 1 \quad T = 0, S = 2 \\ \sigma = 0 \quad T + S = 0 &\Rightarrow \quad T = 0, S = 0 \\ \sigma = 0 \quad T + S = 0 &\Rightarrow \quad T = 0, S = 0 \end{aligned} \quad (3.70)$$

Para la reducción del grupo $U_{sd}(6)$ al grupo $SU_{sd}(3)$, se debe tomar en consideración que el número de bosones en la representación simétrica $[N] = [2]$, corresponde a dos huecos y para este caso las irreps. (λ, μ) del grupo $SU_{sd}(3)$ están dadas por:

$$(\lambda, \mu) = (0, 4) \oplus (2, 0) \quad (3.71)$$

esta ecuación define el contenido de los grupos $SU(3)$ para cada cúmulo.

En el proceso mediante el que se determinarán los parámetros del modelo, primero necesitamos conocer los valores de las variables físicas involucradas en el valor de expectación del Hamiltoniano algebraico (3.64). El valor de β_{fis} está tomado de tablas existentes en la literatura e.g. [66], mismos que han sido corregidos debido a la gran deformación de este tipo de núcleos, utilizando la fórmula que relaciona el coeficiente de transición cuadrupolar $B(E2; 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ con el valor de la deformación dentro del modelo colectivo Rotacional-Vibracional [67]. Considerando el potencial geométrico resultante y el siguiente conjunto de variables físicas para el núcleo ^{12}C :

$$\begin{aligned} \beta_{fis.}(^{12}\text{C}) = \beta_{1fis.} = -0.5 &= \beta_{2fis.} \\ N_{21}(^{12}\text{C}) = N_{21} = 2 &= N_{22} \end{aligned} \quad (3.72)$$

se obtiene la siguiente expresión para el potencial en el límite $N \rightarrow \infty$. En esta expresión únicamente aparecen los términos relacionados con la distancia relativa r , mientras que

aquellos relacionados únicamente con los núcleos individuales están considerados como una constante aditiva:

$$\langle H \rangle = (\chi_R + \chi_T) \left(\frac{r}{\sqrt{2}b} \right)^4 + (4(\chi_R + \chi_T) + 8\chi_T + \chi_\omega) \left(\frac{r}{\sqrt{2}b} \right)^2 + cte \quad (3.73)$$

donde se ha utilizado la relación (3.65) que para el caso del ^{12}C resulta, $\beta_i = \beta_{iba-i} = 1.27$ y para los ángulos de inclinación del eje principal de cada uno de los núcleos respecto al eje molecular, se ha considerado el caso $\theta_{21} = -\theta_{22} = 90^\circ$, que corresponde a la posición de equilibrio para el movimiento tipo mariposa de los núcleos [20, 21]. El potencial (3.73) puede presentar un mínimo dependiendo del signo y magnitud de los parámetros χ_R y χ_T .

Considerando que el valor mínimo en este potencial debe presentarse para una separación entre los núcleos de $r_0 = 5.75$ fm, de acuerdo a los cálculos de "doble-convolución" [68] para esta molécula. En este caso se considera que el momento de inercia está aproximadamente dado por el valor de $\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}$. Donde μ resulta ser la masa reducida [20, 21] y r_0 es la posición del mínimo del potencial molecular. Considerando este valor para el mínimo del potencial se encuentra la siguiente relación entre los parámetros χ_R y χ_T del modelo, i.e:

$$0 = 2(\chi_R + \chi_T) \frac{r_0^2}{2b^2} + (4(\chi_R + \chi_T) + 8\chi_T + \chi_\omega) \quad (3.74)$$

Sin embargo, aún falta por determinar el valor de la cantidad $\frac{1}{2b^2} \simeq 0.075 \hbar \omega_r$. Esta cantidad determina, de manera única, la *base de estados para el grupo* $U_R(4)$. Teniendo el valor de la cantidad anterior, usando la ecuación (3.74) podemos obtener una relación entre los parámetros χ_R , χ_ω y χ_T .

Conociendo la relación anterior podemos determinar de manera única, como veremos más adelante, el valor mínimo del número cuántico $n_r = n_0$ correspondiente a la banda base vibracional de la molécula nuclear.

Para determinar el valor mínimo de $n_r = n_0$, primero es necesario determinar el espacio de Hilbert correspondiente al modelo en la cercanías de este mínimo. El valor del número cuántico para las oscilaciones relativas $n_r = n_0$, tiene que ser diferente de cero para obtener estados que se encuentren centrados a una distancia diferente de cero. Evidentemente este valor depende de la base que se esté considerando i.e. el valor de $\hbar \omega_r$ que se está considerando. En la tabla 3.2 se presentan algunas representaciones irreducibles cercanas al valor mínimo $n_r = n_0$.

Para las irreps anteriores hemos considerado que cada núcleo de carbón está descrito por la irrep (0, 4) y que el estado base de la molécula está asociado con la irrep (λ_c, μ_c) del grupo $SU_C(3)$, correspondiente a la representación más prolata posible, i.e. la irrep $(\lambda_c, \mu_c) = (4, 0)$. Esta suposición se encuentra justificada debido a que los dos núcleos

| n_r | C_1 C_2 | C_{12} | C_{12R} | κ | L | $C_2 (SU_T(3))$ |
|-----------|------------------|----------|----------------|-----------------------|--|-----------------------|
| n_0 | (0, 4) (0, 4) | (0, 8) | $(n_0, 8)$ | 8 6 4 2 0 | $L = 8, 9, \dots, n_0 + 8$ $L = 6, 7, 8, \dots, n_0 + 6$ $L = 4, 5, \dots, n_0 + 4$ $L = 2, 3, \dots, n_0 + 2$ $L = 0 \text{ ó } 1, \dots, n_0 - 2, n_0$ | $n_0^2 + 11n_0 + 88$ |
| $n_0 + 2$ | (0, 4) (0, 4) | (0, 8) | $(n_0 + 2, 8)$ | 8 6 4 2 0 | $L = 8, 9, \dots, n_0 + 10$ $L = 6, 7, \dots, n_0 + 8$ $L = 4, 5, \dots, n_0 + 6$ $L = 2, 3, \dots, n_0 + 4$ $L = 0, 2, \dots, n_0 + 2$ | $n_0^2 + 15n_0 + 114$ |
| $n_0 - 2$ | (0, 4) (0, 4) | (0, 8) | $(n_0 - 2, 8)$ | 8 6 4 2 0 | $L = 8, 9, \dots, n_0 + 6$ $L = 6, 7, \dots, n_0 + 4$ $L = 4, 5, \dots, n_0 + 2$ $L = 2, 3, \dots, n_0$ $L = 0, 2, \dots, n_0 - 2$ | $n_0^2 + 7n_0 + 70$ |
| n_0 | (0, 4) (0, 4) | (2, 4) | $(n_0 + 2, 4)$ | 4 2 0 | $L = 4, 5, \dots, n_0 + 6$ $L = 2, 3, \dots, n_0 + 4$ $L = 0 \text{ ó } 1, \dots, n_0, n_0 + 2$ | $n_0^2 + 11n_0 + 46$ |
| $n_0 + 2$ | (0, 4) (0, 4) | (2, 4) | $(n_0 + 4, 4)$ | 4 2 0 | $L = 4, 5, \dots, n_0 + 8$ $L = 2, 3, \dots, n_0 + 6$ $L = 0 \text{ ó } 1, \dots, n_0, n_0 + 4$ | $n_0^2 + 15n_0 + 72$ |
| $n_0 - 2$ | (0, 4) (0, 4) | (2, 4) | $(n_0, 4)$ | 4 2 0 | $L = 4, 5, \dots, n_0 + 4$ $L = 2, 3, \dots, n_0 + 2$ $L = 0 \text{ ó } 1, \dots, n_0 - 2, n_0$ | $n_0^2 + 7n_0 + 28$ |
| n_0 | (0, 4) (0, 4) | (4, 0) | $(n_0 + 4, 0)$ | 0 | $L = 0, 2, \dots, n_0 + 4$ | $n_0^2 + 11n_0 + 28$ |
| $n_0 + 2$ | (0, 4) (0, 4) | (4, 0) | $(n_0 + 6, 0)$ | 0 | $L = 0, 2, \dots, n_0 + 6$ | $n_0^2 + 15n_0 + 54$ |
| $n_0 - 2$ | (0, 4) (0, 4) | (4, 0) | $(n_0 + 2, 0)$ | 0 | $L = 0, 2, \dots, n_0, n_0 + 2$ | $n_0^2 + 7n_0 + 10$ |

Tabla 3.2: Representaciones irreducibles utilizadas para el ajuste del espectro energético del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

de carbón en la molécula nuclear se encuentran alineados, formando un sistema prolato. Posteriormente esta irrep del grupo $SU_C(3)$ tiene un acoplamiento máximo con la irrep $(n_R, 0)$ del grupo $SU_R(3)$, de manera que la irrep de banda vibracional base será: $(n_0 + 4, 0)$. Los estados excitados se encuentran dados por los diferentes acoplamientos de las irreps de los cúmulos con la irrep del movimiento relativo y por los diferentes valores posibles del número cuántico vibracional, i.e: $n_r = n_0 \pm 1$, $n_0 \pm 2$, etc. Debido a esta

última observación, podemos esperar una degeneración a energías bajas entre estados con números vibracionales $n_0 + 1$ y $n_0 - 1$, etc., que puede removerse debido a la interacción entre los cúmulos.

El valor de n_0 se obtiene considerando la siguiente expresión para la energía, utilizando las irreps anteriores de los grupos $SU(3)$ para la banda vibracional base:

$$\begin{aligned}
 E = & \chi_1(\lambda_1^2 + \mu_1^2 + \lambda_1\mu_1 + 3(\lambda_1 + \mu_1)) \\
 & + \chi_2(\lambda_2^2 + \mu_2^2 + \lambda_2\mu_2 + 3(\lambda_2 + \mu_2)) \\
 & + \chi_{12}(\lambda_C^2 + \mu_C^2 + \lambda_C\mu_C + 3(\lambda_C + \mu_C)) + \chi_\omega n_r + \chi_R(n_r^2 + 3n_r) \\
 & + \chi_T(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu)) \\
 & + \chi_N((\lambda_C^2 + \mu_C^2 + \lambda_C\mu_C + 3(\lambda_C + \mu_C)) - \langle C_2(SU_C(3)) \rangle_{\theta_0}) n_r \\
 & + aL(L+1) + cK^2 .
 \end{aligned}$$

Minimizando el valor de esta energía respecto a n_r , obtenemos la siguiente expresión para n_0 en términos de los parámetros del Hamiltoniano:

$$n_0 = - \frac{[3\chi_R + 3\chi_T + \chi_\omega + \chi_T(2\lambda_C + \mu_C)]}{2(\chi_R + \chi_T)} - \frac{\chi_N(\lambda_C^2 + \mu_C^2 + \lambda_C\mu_C + 3(\lambda_C + \mu_C) - \langle C_2(SU_C(3)) \rangle_{\theta_0})}{2(\chi_R + \chi_T)} \quad (3.75)$$

Naturalmente, son de interés físico únicamente aquellos valores de la frecuencia relativa que resultan en valores de n_0 lo más cercanos posible a un número entero par (el estado base tiene momento angular $L = 0$ y paridad positiva). Cuando el valor de b cambia, también cambia el valor de n_0 , como es de esperarse, porque se está seleccionando otra base de estados de $U_r(4)$. La única condición que podemos imponer es que el valor de n_0 sea lo más cercano posible a un número par. Para el número cuántico N se ha considerado un valor de $N = 100$, que permite tener un corte suficientemente elevado en el espectro vibracional de energía.

Cuando se varían los valores de b y N , cambiando la base de estados de $U_r(4)$, después de ajustar el espectro del sistema, los valores de los diferentes parámetros χ también cambiarán, debido a que el espectro ajustado debe permanecer inalterado.

Sin embargo, para determinar el valor de la longitud de oscilación característica, es necesario considerar que el valor de expectación del operador del número de bosones p , en el estado coherente $|N; \delta_1\rangle$ para la distancia relativa del mínimo r_0 , resulte igual al valor del número de excitaciones relativas n_0 para el que la energía de la molécula resulta ser mínima como función de n_r , i.e.,

$$\frac{r_0^2}{2b^2} = n_0 = \langle N; \delta_1 | p^\dagger \cdot p | N; \delta_1 \rangle .$$

Considerando las condiciones anteriores, los estados de más baja energía de la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ (ver la tabla 3.1) pueden utilizarse para encontrar los valores de los parámetros de este modelo. Los valores de los parámetros del Hamiltoniano obtenidos del ajuste de estos estados, se resumen a continuación:

$$\begin{aligned}
 \chi_R &= 0.82866 \text{ MeV} \\
 \chi_T &= -0.0412 \text{ MeV} \\
 \chi_{12} &= 0.16438 \text{ MeV} \\
 \chi_\omega &= -15.4202 \text{ MeV} \\
 \chi_N &= -0.0132 \text{ MeV} \\
 n_0 &= 8 \\
 a &= 0.104 \text{ MeV} \\
 c &= 0.1225 \text{ MeV} \\
 b &= 1.437 \text{ fm.}
 \end{aligned}
 \tag{3.76}$$

Los valores numéricos para el espectro de energía del sistema molecular $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, que resultan del modelo, se muestran en la Tabla 3.3. En esta tabla también se comparan los valores del modelo con los valores experimentales [24, 41] y los del modelo $SO(4)$ de Erb y Bromley [41].

También en la figura 3.5 se muestra el espectro del modelo $U(3)$ comparado con el espectro experimental (panel izquierdo de esta figura). En la figura 3.6 se compara el espectro del modelo $U(3)$ con el espectro del modelo $SO(4)$.

| L=0 | | | L=2 | | | L=4 | | | L=6 | | | L=8 | | |
|------|---------|--------|------|---------|--------|------|---------|--------|-------|---------|--------|-------|---------|--------|
| Exp. | $SO(4)$ | $U(3)$ | Exp. | $SO(4)$ | $U(3)$ | Exp. | $SO(4)$ | $U(3)$ | Exp. | $SO(4)$ | $U(3)$ | Exp. | $SO(4)$ | $U(3)$ |
| 3.17 | 3.44 | 3.17 | 3.75 | 3.90 | 3.79 | 4.46 | 4.96 | 5.26 | 6.49 | 6.63 | 7.56 | 9.65 | 8.91 | 10.70 |
| 3.35 | 4.4 | 3.49 | 4.62 | 4.86 | 4.12 | 5.77 | 5.92 | 5.58 | 7.55 | 7.59 | 7.88 | 9.84 | 9.87 | 11.02 |
| 4.25 | 5.2 | 4.25 | 4.88 | 5.66 | 4.61 | 5.96 | 6.72 | 6.07 | 8.86 | 8.39 | 8.37 | 10.30 | 10.67 | 11.51 |
| 5.80 | 5.84 | 5.80 | 5.00 | 6.3 | 4.88 | 6.85 | 7.36 | 6.34 | 9.05 | 9.03 | 8.64 | 10.63 | 11.31 | 11.78 |
| 5.97 | 6.32 | 5.97 | 5.37 | 6.78 | 5.37 | 7.30 | 7.84 | 6.83 | 9.33 | 9.51 | 9.13 | 10.90 | 11.79 | 12.27 |
| | 6.64 | 6.42 | 5.64 | 7.1 | 5.84 | 7.45 | 8.16 | 7.30 | 9.98 | 9.83 | 9.60 | 11.20 | 12.11 | 12.74 |
| | 6.8 | | 5.80 | 7.26 | 6.13 | 7.71 | 8.32 | 7.54 | 10.45 | 9.99 | 9.84 | 11.38 | 12.27 | 12.98 |
| | | | 6.01 | | 6.60 | 7.90 | | 7.89 | | | 10.19 | 11.90 | | 13.33 |
| | | | 6.25 | | 6.82 | 8.26 | | 8.06 | | | 10.36 | 12.36 | | 13.50 |
| | | | 6.63 | | 6.92 | 8.45 | | 8.28 | | | 10.58 | 12.98 | | 13.72 |
| | | | 7.05 | | 7.05 | | | 8.30 | | | 10.60 | | | 13.74 |
| | | | | | 7.09 | | | 8.38 | | | 10.68 | | | 13.82 |
| | | | | | | | | 9.67 | | | 11.41 | | | 13.78 |
| | | | | | | | | 9.85 | | | 11.59 | | | 13.96 |

Tabla 3.3: Espectro de energía del sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, en el modelo con estructura interna, ($U_R(3) = U(3)$) comparado con los resultados experimentales (Exp.) y los del modelo ($SO_R(4) = SO(4)$) [24, 41].

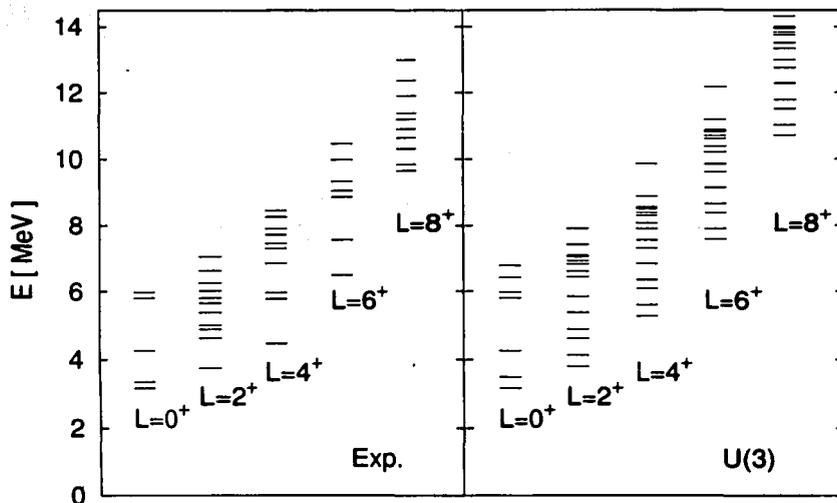


Figura 3.5: Espectro de energía de la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, para el caso del modelo algebraico con estructura interna de los núcleos. En la parte izquierda de esta gráfica se muestran los datos experimentales y en la parte derecha los resultados teóricos.

Nótese que en el modelo de Erb únicamente aparecen estados de paridad positiva [41], porque este modelo no considera la estructura de los cúmulos (como se explicó previamente en la sección 3.2). Por otra parte, en el modelo pueden aparecer estados de paridad negativa y momento angular impar.

¿Por qué estos estados de paridad negativa en la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ no se han observado hasta la fecha? El sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ posee una simetría discreta ante el intercambio de núcleos, por lo que si el estado inicial del sistema tiene una paridad positiva, excitaciones de este sistema respecto a este estado no podrán llevar al sistema a un estado de paridad negativa. La única manera de observar estos estados de paridad positiva es mediante excitaciones elevadas del sistema compuesto ^{24}Mg en la región del

sistema molecular $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$.

También es importante observar que la "calidad" del espectro de este modelo en relación con el obtenido por Erb [41] es muy parecida.

En los experimentos para esta molécula hay algunos estados que no se encuentran presentes en las predicciones teóricas. También puede observarse el caso inverso donde estados teóricos no pueden ser identificados con algún estado experimental. Es necesario tener en cuenta que los estados mencionados en las tablas experimentales [24] para este sistema no todos han sido completamente verificados experimentalmente, y resulta difícil decidir cuales de estos estados no son realmente estados moleculares [69].

En la figura 3.7 puede observarse la clasificación de los estados vibracionales y rotacionales, de paridad positiva del sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, usando los valores de los parámetros de la ecuación (3.76).

En la figura 3.7 se ve que existe una gran mezcla entre los estados vibracionales y rotacionales, correspondientes a los diferentes acoplamientos entre las irreps de la estructura interna con el movimiento relativo. Esta mezcla se debe, principalmente, a que el valor obtenido para el momento de inercia resulta ser muy "pequeño".

Una vez que se ha ajustado de manera satisfactoria el espectro de energía de la molécula $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, se pueden utilizar los parámetros de este ajuste para encontrar el potencial internuclear de este sistema, en función de la distancia relativa. El potencial resultante se muestra en la figura 3.8, donde se compara el ajuste del potencial mapeado (MG) con los potenciales de "doble-convolución" (DC) para dos diferentes orientaciones de los núcleos respecto al eje molecular.

Los potenciales de "doble-convolución" para el sistema $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, al igual que los otros potenciales moleculares que se considerarán en este trabajo de investigación, fueron calculados por Ş. Mişicu mediante este método, mismo que se presenta en el apéndice 1.

En la figura 3.8 se observa un comportamiento general muy diferente, entre el potencial mapeado del Hamiltoniano algebraico y los potenciales moleculares obtenidos por el método de "doble-convolución", para separaciones relativas grandes, respecto al mínimo del potencial molecular.

Estas diferencias se deben principalmente a que en el modelo con estructura interna sólo se consideran operadores de Casimir de primer y segundo orden. De estos se obtiene una dependencia en la distancia relativa hasta términos proporcionales a r^{-4} en la separación relativa, obteniéndose de esta forma un comportamiento muy rígido para separaciones relativas alejadas de la posición del mínimo.

Al obtener el potencial molecular asociado con el Hamiltoniano algebraico, se encontró que: si en el Hamiltoniano (3.53) no se considera el término proporcional a χ_N , es posible reproducir el espectro molecular. Sin embargo, el potencial que se obtiene para una orientación relativa diferente, a la de mínima energía, para los ejes de simetría de los núcleos (en nuestro caso $\theta_{21} = -\theta_{22} = 75^\circ$) resulta muy distinto del potencial de "doble-convolución".

Como se verá en la siguiente sección aparecen dificultades similares para el potencial

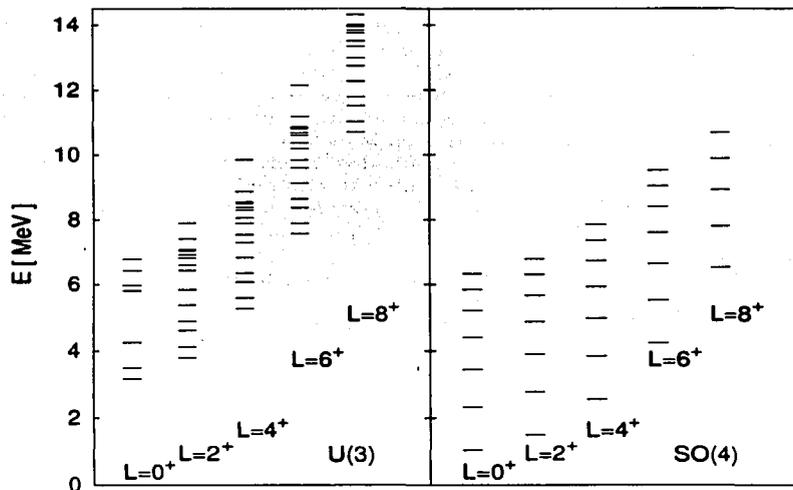


Figura 3.6: Comparación del espectro teórico para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, en el modelo $SO(4)$ sin estructura interna [41] y en nuestro modelo $U(3)$ con estructura interna.

mapeado del Hamiltoniano, cuando se parte de reproducir el potencial molecular para obtener posteriormente el espectro de la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$.

3.5.2. Ajuste del potencial mapeado al potencial calculado mediante el método de “doble-convolución” para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

En esta sección, siguiendo el procedimiento inverso se trata primero de reproducir las principales características de los potenciales internucleares de “doble-convolución”, para la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, con el potencial asociado al Hamiltoniano del modelo. Posteriormente se obtienen las características generales del espectro de la molécula nuclear.

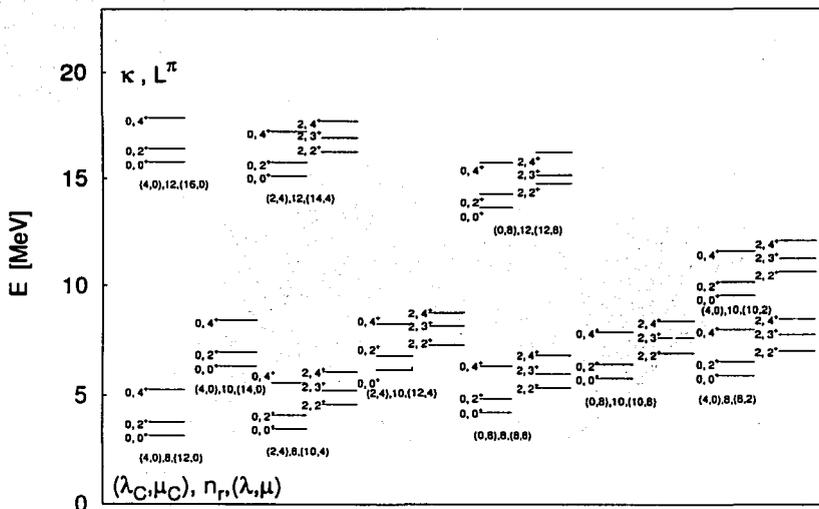


Figura 3.7: Clasificación de los niveles de energía para la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ en nuestro modelo con estructura interna.

Con este procedimiento es posible realizar predicciones sobre los espectros de energía de moléculas nucleares para las que aún no hay información experimental de sus espectros.

Para ajustar el potencial mapeado con el potencial de “doble-convolución” se reprodujeron las siguientes características del potencial de “doble-convolución”:

Primero:

$$\frac{\partial V}{\partial r} |_{r_0, r_0} = 0 \quad ,$$

esta condición resulta necesaria para que ambos potenciales presenten su mínimo en la misma orientación y posición.

La segunda condición que se considera es que el potencial mapeado del Hamiltoniano del modelo presente la misma curvatura que el potencial de “doble-convolución” en la

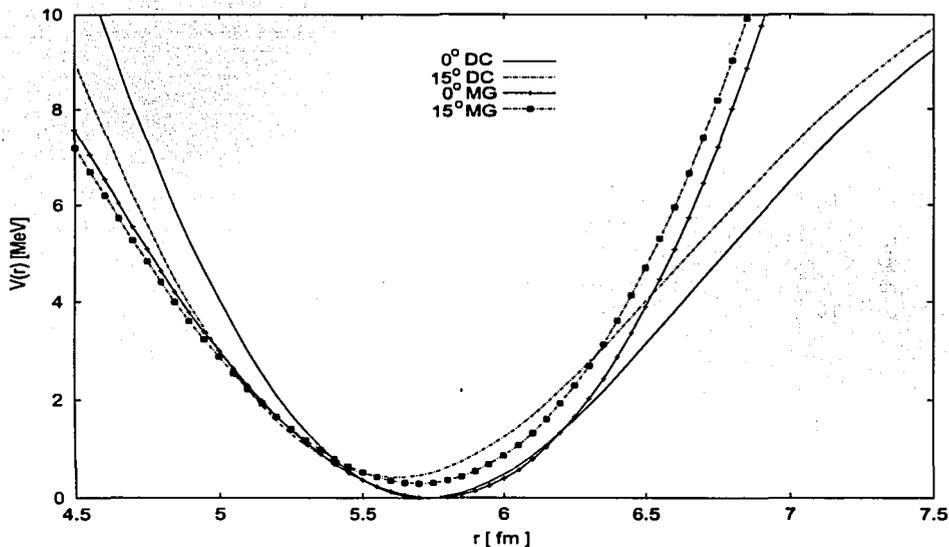


Figura 3.8: Comparación entre el potencial de "doble-convolución" (DC) y el potencial que resulta del mapeo geométrico (MG) del Hamiltoniano del modelo, para la molécula nuclear $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$, para dos diferentes orientaciones simétricas de los ejes de simetría de los núcleos $\Theta_{21} = -\Theta_{22} = 0^\circ, 15^\circ$ con $\theta_{2i} = \Theta_{2i} + 90^\circ$.

posición del mínimo $r = r_0, \theta = \theta_0$:

$$C_r = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \right|_{\theta_0, r_0} = \frac{2(\chi_R + \chi_T)r_0^2}{b^4},$$

donde C_r es la curvatura del potencial de "doble-convolución" para la orientación y distancia relativa mínimas.

La tercera condición considerada es que el valor de expectación del operador del número \hat{n}_p en el estado coherente $|N; \delta_1\rangle$, para $r = r_0$, resulte igual al valor del número de excitaciones relativas n_0 para el que la energía de la molécula (3.55) resulta ser mínima como función de n_r , i.e:

$$\frac{r_0^2}{2b^2} = n_0 = \langle N; \delta_1 | p^\dagger \cdot p | N; \delta_1 \rangle .$$

Finalmente, como cuarta condición, se puede utilizar alguna información adicional del potencial para otra orientación relativa de los núcleos pesados respecto del eje molecular. Por ejemplo, ajustar el valor de la primera derivada (C_{r,θ_1}) del potencial de "doble-convolución" para la orientación relativa $\theta = \theta_1$ para la misma distancia relativa $r = r_0$, i.e:

$$\frac{\partial V}{\partial r} |_{r_0\theta_1} = C_{r,\theta_1} .$$

Para satisfacer esta última condición fue necesario considerar el término proporcional a χ_N en el Hamiltoniano. Si no se considera este término se obtiene una contradicción entre esta condición y las primeras tres condiciones. Esto puede observarse en la figura 3.9, donde fue posible reproducir el potencial molecular en los alrededores del mínimo, para la orientación de mínima energía. Sin embargo, el potencial que resulta del modelo para otra orientación relativa de los núcleos, difiere mucho del potencial molecular obtenido en el método de "doble-convolución".

Considerando las cuatro condiciones anteriores se obtiene una relación entre los parámetros χ_T y χ_ω i.e:

$$f(\chi_\omega, \chi_T) = 0,$$

como se observa en la figura 3.10. En esta figura también se han indicado las diferentes ramas de las soluciones para los parámetros χ_T y χ_ω dependiendo de los valores de los parámetros b , $(\chi_R + \chi_T)$ y n_0 para los que las soluciones: $b > 0$, $(\chi_R + \chi_T) > 0$, $n_0 > 0$ son las únicas de interés físico.

Aunque estas condiciones no permiten determinar de manera única los parámetros del Hamiltoniano, si permiten reproducir de manera satisfactoria las características generales del potencial de "doble-convolución" en las cercanías del mínimo. El potencial resultante se muestra en la figura 3.11.

Al comparar el potencial mapeado que resulta de ajustar las cuatro condiciones anteriores (figura 3.11), con el potencial que resulta del ajuste del espectro de la sección anterior (figura 3.5), se observa que ambos presentan características similares en las cercanías del mínimo absoluto del potencial de "doble-convolución".

Es importante mencionar que, para todos los valores permitidos de los parámetros χ'_S que se obtienen al satisfacer las cuatro condiciones consideradas en esta sección, todos los potenciales resultantes presentan un comportamiento casi idéntico.

El resultado anterior sugiere que, considerar sólo esta información geométrica no es suficiente para determinar de manera única el espectro asociado con la molécula nuclear. Estos resultados contrastan considerablemente con los resultados de los modelos geométricos para moléculas nucleares, donde es posible determinar completamente los

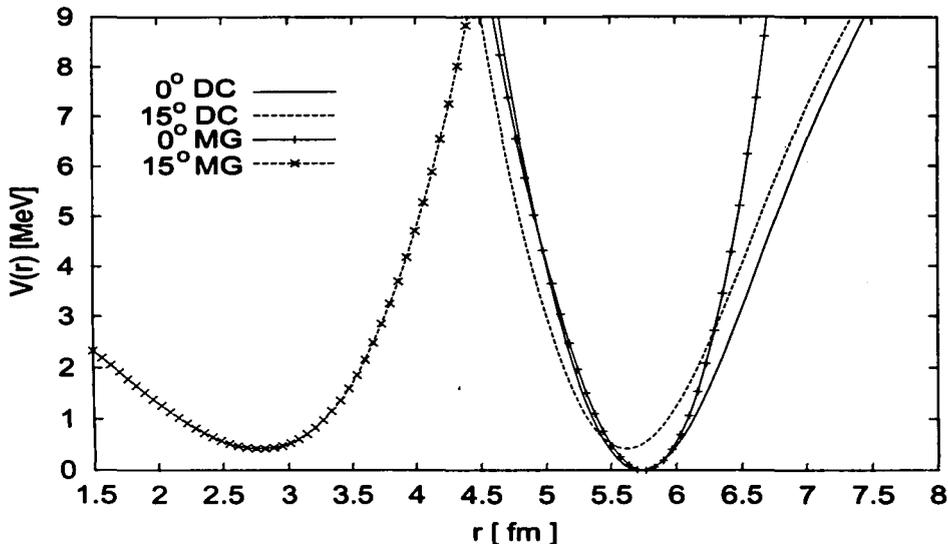


Figura 3.9: Comparación de los potenciales de "doble-convolución" (DC) y el potencial que resulta del mapeo geométrico (MG), con los parámetros $\{\chi_s\}$ determinados con las condiciones consideradas en esta sección. Para el caso en que no se consideran en el Hamiltoniano el término proporcional a χ_N .

parámetros del Hamiltoniano, mientras que, como se vio en los resultados anteriores en este modelo algebraico no es posible determinar de manera única los parámetros.

Para obtener de forma única los espectros moleculares, es necesario reproducir con el mapeo geométrico la energía cinética de la molécula y la energía potencial de la misma. Sin embargo, al reproducir la energía cinética con el mapeo geométrico no se obtienen buenas aproximaciones para ésta cuando se consideran los valores de expectación en estados de prueba (como resulta en el método generador de coordenadas [58]). Con frecuencia es necesario considerar alguna transformación canónica para los parámetros del estado de prueba que resultan en una expresión más apropiada para la energía cinética del sistema [70].

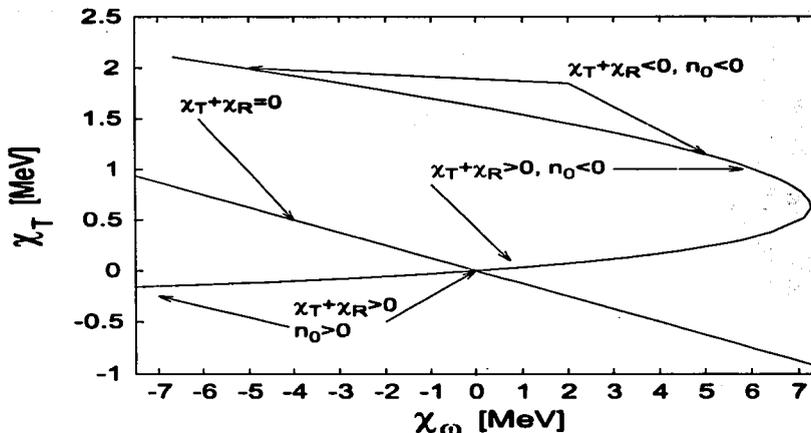


Figura 3.10: Relación entre los parámetros χ_T y χ_ω obtenidas al reproducir el potencial de “doble-convolución” para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

Trabajos futuros en modelos algebraicos para moléculas nucleares deben reproducir las energías cinética y potencial obtenidas en modelos geométricos mapeando el Hamiltoniano algebraico de los modelos.

El espectro de energía que resulta al ajustar los parámetros χ'_S del Hamiltoniano ajustando el potencial intermolecular, no se encuentra determinado de manera única debido a las restricciones encontradas para los parámetros. Sin embargo, es posible calcular los espectros de energía que resultan para diferentes conjuntos de valores de parámetros χ'_S , como se muestra en la figura 3.12 para dos diferentes conjuntos de parámetros.

En la figura 3.12 se observa la posibilidad de obtener espectros con diferentes características en función del parámetro χ_ω , partiendo de ajustar el potencial intermolecular.

Al comparar los espectros de la figura 3.12 con el espectro obtenido ajustando directamente los datos experimentales (tabla 3.3), se observa que para el espectro correspondiente al valor del parámetro $\chi_\omega = -2.5$ MeV, los espectros obtenidos siguiendo ambos procedimientos resultan ser muy similares.

El resultado anterior muestra que el procedimiento de ajustar el potencial molecular y de éste obtener el espectro del sistema, puede ser adecuado para obtener algunas

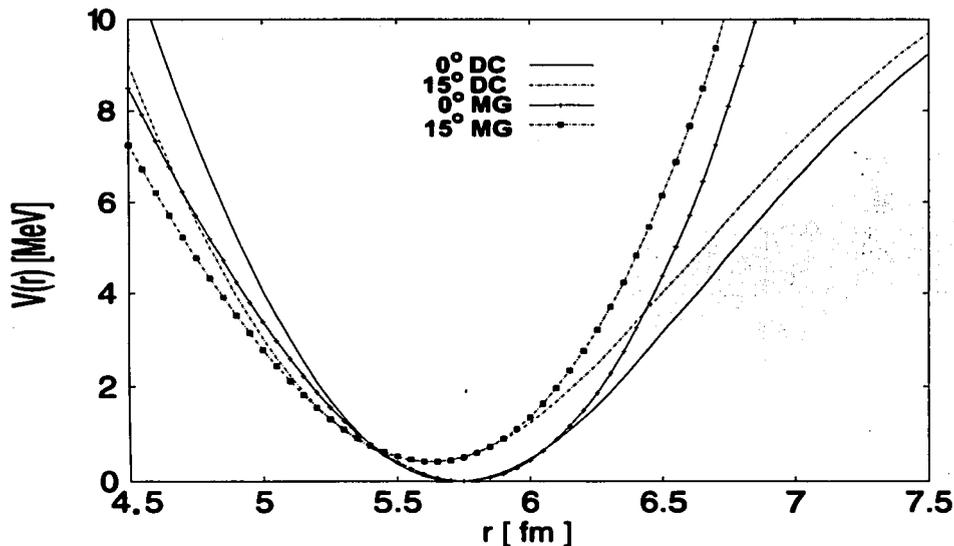


Figura 3.11: Comparación de los potenciales de “doble-convolución” (DC) y el potencial resultante del mapeo geométrico (MG), para los valores de los parámetros $\{\chi\}$ obtenidos de las cuatro condiciones de esta sección.

características generales de los espectros de energía para moléculas nucleares, para las que aún no existe información experimental de sus espectros.

3.5.3. Aplicación del modelo algebraico al sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$

Ahora se aplicará el modelo algebraico fenomenológico al sistema de dos núcleos pesados $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$. La descripción de este sistema puede efectuarse considerando el modelo algebraico IBM-1 con un grupo $U_C(6)$, para describir los grados de libertad internos de cada uno de los núcleos [15], y para el movimiento relativo de los núcleos nuevamente podemos utilizar un grupo $U_R(4)$ [15, 16].

El núcleo ^{96}Sr , tiene 10 protones por encima de una capa cerrada, que corresponde a

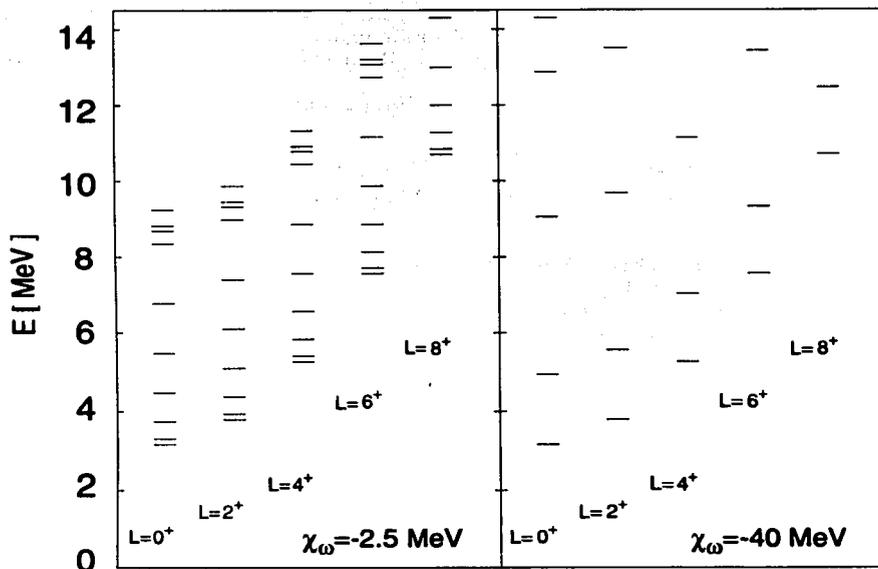


Figura 3.12: Espectro de energía para el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, que resulta de ajustar los parámetros del Hamiltoniano partiendo de un potencial intermolecular conocido del cálculo de “doble-convolución”. Donde se muestra el espectro resultante para dos diferentes conjuntos de valores de parámetros $\{\chi\}$ en función del valor de χ_ω indicado en los dos paneles.

5 bosones en el modelo IBM. Además posee 8 neutrones por encima de una capa cerrada, que corresponde a 4 bosones en el modelo IBM, por lo que se obtiene $N(\text{Sr}) = N_{21} = 9$.

El núcleo ^{146}Ba , tiene 6 protones por encima de una capa cerrada, que corresponde a 3 bosones en el modelo IBM. Además posee 8 neutrones por encima de una capa cerrada, que corresponde a 4 bosones en el modelo IBM, por lo que se obtiene $N(\text{Ba}) = N_{22} = 7$.

El Hamiltoniano que corresponde a la cadena dinámica (3.52) está dado por la ecuación (3.53). En el caso del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$ las irreps de $SUC(3)$ para los núcleos resultan ser; (18, 0) y (14, 0) para el Sr y Ba, respectivamente. La irrep de menor energía a

la que se acoplan las representaciones individuales de los núcleos, está dada por $(\lambda_C, \mu_C) = (32, 0)$, que corresponde a la representación más prolata posible.

El potencial geométrico que resulta del Hamiltoniano algebraico está dado por la ecuación (3.64).

Para los núcleos ^{96}Sr y ^{146}Ba , los valores de las variables físicas resultan ser:

$$\begin{aligned} \beta(Sr) &= \beta_{1phys} = 0.338 & \beta(Ba) &= \beta_{2phys} = 0.2 \\ N(Sr) &= N_{21} = 9 & N(Ba) &= N_{22} = 7 \end{aligned} \quad (3.77)$$

Los valores para las deformaciones de estos núcleos fueron tomados de las tablas de Möller y Nix [71]. Estas deben transformarse de acuerdo a la ecuación (3.65) para obtener los valores de las deformaciones β_{IBM} . Obteniendo finalmente los siguientes valores para los parámetros β_i : $\beta_{1-IBM} = 1.53$ para el núcleo de Sr y $\beta_{2-IBM} = 1.77$ para el núcleo de Ba .

Para $N = 100$, se puede reproducir con el potencial mapeado los potenciales moleculares para este sistema, calculados por Ş. Mişicu mediante el método de "doble-convolución" [49] presentado en el apéndice 1.

Para el sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, se pueden reproducir las principales características del potencial molecular con el potencial mapeado del modelo. Tomando de la ecuación (3.77) los valores de los parámetros para los núcleos de este sistema.

En este ajuste se consideran dos diferentes orientaciones relativas de los ejes principales de los núcleos, respecto al eje molecular. La primera de estas orientaciones, donde los dos núcleos se encuentran alineados a lo largo del eje molecular ($\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$), corresponde a la posición de equilibrio del movimiento tipo mariposa de la molécula. Para esta configuración molecular el valor de expectación del Hamiltoniano (3.53), para $L = 0$ y $K = 0$, resulta ser:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= (\chi_R + \chi_T) \left(\frac{r^2}{2b^2} \right)^2 + [4(\chi_R + \chi_T) + 63.51\chi_T + \chi_\omega] \left(\frac{r^2}{2b^2} \right) \\ &+ 495(\chi_{12} + \chi_T) + const \quad , \end{aligned} \quad (3.78)$$

donde la constante aditiva es independiente de r pero depende de los valores de los parámetros $\{\chi's\}$, β_i y de la orientación ($\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$).

La otra orientación relativa entre los núcleos que se ha considerado está dada por $\theta_{21} = -\theta_{22} = 15^\circ$. En este caso, el valor de expectación del Hamiltoniano (3.53), está dado por:

$$\begin{aligned}
 \langle H \rangle = & (\chi_R + \chi_T) \left(\frac{r^2}{2b^2} \right)^2 + [4(\chi_R + \chi_T) + 57.13\chi_T + \chi_\omega] \left(\frac{r^2}{2b^2} \right) \\
 & + [-185.78\chi_N] \left(\frac{r^2}{2b^2} \right) + 310(\chi_{12} + \chi_T) + const \quad . \quad (3.79)
 \end{aligned}$$

Los valores para los parámetros del Hamiltoniano (3.53) obtenidos del ajuste del potencial geométrico se muestran en la siguiente tabla:

$$\begin{aligned}
 \chi_R &= 0.286 \text{ MeV} \\
 \chi_T &= -0.146 \text{ MeV} \\
 \chi_{12} &= 0.606 \text{ MeV} \\
 \chi_\omega &= -12.03 \text{ MeV} \\
 \chi_N &= 0.014 \text{ MeV} \\
 n_0 &= 74 \\
 a &= 0.00218 \text{ MeV} \\
 c &= 0 \text{ MeV} \\
 b &= 1.06 \text{ fm.} \quad (3.80)
 \end{aligned}$$

El parámetro a se ha calculado del momento de inercia y el parámetro c , como se mencionó anteriormente, no puede ajustarse del potencial geométrico. La comparación del potencial geométrico "doble-convolución" y el obtenido al considerar los valores anteriores de los parámetros $\{\chi'_s\}$ se muestra en la figura 3.13. Para el potencial de "doble-convolución" se puede observar que la posición del mínimo de éste ocurre a una distancia $r = 12.90 \text{ fm}$, para la orientación molecular lineal, y coincide con el mínimo de potencial asociado con el Hamiltoniano algebraico (3.53).

Utilizando los valores de estos parámetros (3.80) podemos obtener el espectro de energías del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, considerando las irreps de menor energía del grupo $SU(3)$ dadas por $(74 + k, 0)$; con $k = \pm 1, \pm 2$. Estos corresponden a las bandas vibracionales de menor energía acopladas de forma máxima con la irrep $(\lambda_C, \mu_C)(32, 0)$ de los núcleos previamente acoplados entre sí.

El espectro de energía que resulta para el sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$ se muestra en la figura 3.14. En esta figura también podemos observar estados de mayor energía que corresponden a otros acoplamientos entre los núcleos e.g. $(\lambda_C, \mu_C) = (30, 1)$ acoplados posteriormente con el grupo $SU_R(3)$. También se muestran los primeros estados excitados de los núcleos ^{96}Sr y ^{146}Ba como núcleos aislados.

En la figura 3.14 únicamente se muestran las cabezas de las bandas vibracionales y en la figura 3.15 se muestra la estructura rotacional de la banda vibracional base y de las dos primeras bandas vibracionales excitadas.

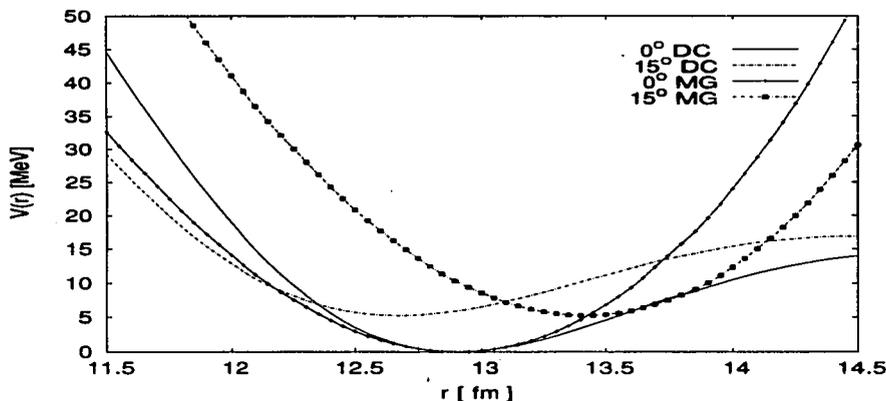


Figura 3.13: Potenciales moleculares, para el sistema $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$, asociados con el mapeo geométrico (MG) del Hamiltoniano 3.53 y los que resultan de la técnica de “doble-convolución” (DC), para dos orientaciones diferentes $\theta = 0^\circ$ y 15° , de los ejes de simetría de los núcleos.

La característica principal del espectro energético obtenido para el sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, es que éste presenta una separación muy grande entre las bandas vibracionales y rotacionales para el sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, y que es muy diferente al de la molécula nuclear de núcleos ligeros $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, en donde la separación entre los estados rotacionales de una banda vibracional y la separación entre bandas vibracionales resulta ser del mismo orden en energía. Esta diferencia se debe a que el momento de inercia en el sistema de núcleos pesados $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ es mucho mayor que en el caso de la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

En este capítulo se ha presentado un modelo algebraico para moléculas nucleares de dos cúmulos, considerando la estructura interna de los mismos.

Aplicando este modelo al sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, reproduciendo sus resonancias moleculares se determinaron los parámetros del Hamiltoniano y con estos parámetros se obtuvo el potencial molecular del sistema. El potencial molecular obtenido presenta un comportamiento similar al de los potenciales moleculares de “doble-convolución” para la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, en las cercanías del mínimo para dos diferentes orientaciones

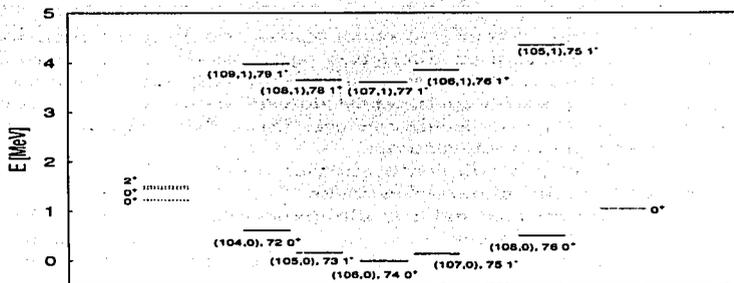


Figura 3.14: Espectro de energía, del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, resultado de considerar los valores de los parámetros del Hamiltoniano (3.53). En este espectro sólo se muestran las cabezas de las bandas vibratoriales para cada banda rotacional. También se pueden observar los primeros estados excitados del núcleo ^{96}Sr (extremo izquierdo) y del núcleo ^{146}Ba (extremo derecho).

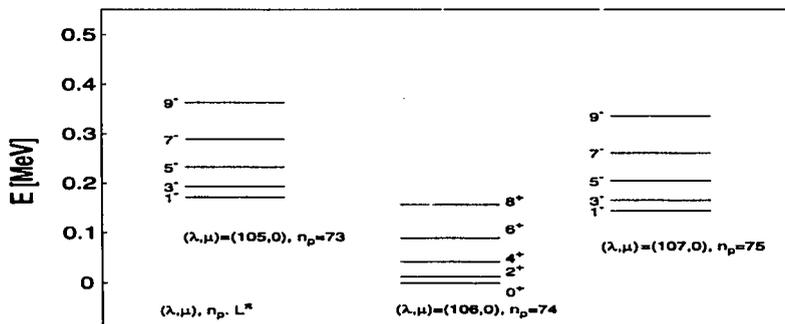


Figura 3.15: Estructura rotacional del espectro de energía del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$, para la banda vibracional base y las primeras bandas vibratoriales excitadas.

relativas de los ejes de simetría de los núcleos de carbón.

Siguiendo el procedimiento inverso, se encontraron restricciones para los parámetros del Hamiltoniano que resultan en diferentes espectros de energía para la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$. Para ciertos valores de estos parámetros el espectro obtenido reproduce muy aproximadamente el espectro experimental de esta molécula. Este procedimiento también se aplicó a la hipotética molécula nuclear $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$, para la que también se obtuvo un espectro de energía característico.

Sin embargo, siguiendo el procedimiento anterior no es posible obtener de manera única los parámetros del Hamiltoniano del modelo.

Para determinar los parámetros del Hamiltoniano del modelo de forma única siguiendo este procedimiento, tal vez será necesario considerar información geométrica adicional para estas moléculas, como puede ser la energía cinética de la molécula o los coeficientes de transiciones electromagnéticas.

Capítulo 4

MODELO ALGEBRAICO PARA MOLÉCULAS DE 3 NÚCLEOS.

El modelo algebraico presentado en el capítulo anterior, para moléculas nucleares de dos cúmulos, puede extenderse fácilmente al estudio de las novedosas moléculas nucleares de tres cúmulos [3, 4, 47]. Como se mencionó en el capítulo 1 este tipo de moléculas se han estudiado mediante modelos geométricos. Sin embargo, estos sólo permiten estudiar configuraciones lineales considerando la estructura interna de los núcleos y configuraciones triangulares de la molécula considerando los núcleos esféricos [8].

En este capítulo presentaremos la extensión del modelo algebraico, discutido en el capítulo anterior, para el caso de moléculas nucleares de tres cúmulos; tomando en cuenta configuraciones lineales y triangulares, y considerando las posibles deformaciones de los núcleos constituyentes.

4.1. Modelo algebraico para moléculas de 3 núcleos con estructura interna.

Como se mencionó anteriormente, existen modelos algebraicos para las moléculas nucleares de tres cúmulos que no consideran la estructura interna de los cúmulos [11, 13]. Estos modelos se encuentran basados en el modelo algebraico $U(7)$ para la estructura hadrónica [9], que posteriormente se extendieron para describir sistemas de tres partículas no idénticas [10]. Utilizando un grupo $U_R(7)$ es posible describir los movimientos relativos de las tres partículas respecto al centro de masa del sistema, utilizando las coordenadas de Jacobi dadas mediante las siguientes relaciones, (el subíndice R indica que este grupo está asociado con el movimiento relativo de los núcleos de la molécula):

$$\begin{aligned}\rho &= \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 \\ \lambda &= \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2} - \mathbf{r}_3\end{aligned}\quad (4.1)$$

Con estas coordenadas tendremos 6 grados de libertad y con el bosón adicional s (s^\dagger) tendremos los siete grados de libertad básicos del modelo algebraico $U_R(7)$. Las variables de la ecuación (4.1) pueden relacionarse con las tres distancias internucleares de la molécula mediante las relaciones inversas:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 &= \rho \\ \mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_1 &= \frac{m_2}{m_1 + m_2} \rho - \lambda \\ \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_3 &= \frac{m_1}{m_1 + m_2} \rho + \lambda\end{aligned}\quad (4.2)$$

Estas distancias intermoleculares, así como las coordenadas de Jacobi, están señaladas en la figura 4.1, donde se ha considerado una configuración triangular para la molécula de tres cúmulos, con el núcleo ligero situado fuera del eje molecular z . En esta figura también se indican los ángulos de inclinación de los ejes moleculares de los núcleos pesados respecto del eje molecular.

El grupo $U_R(7)$ puede generarse mediante los 49 productos bilineales $G_{\alpha\alpha'} = b_\alpha^\dagger b_{\alpha'}$, con ($\alpha = 1, 2, 3, \dots, 7$; $b_\alpha = s, p_{\rho m}, p_{\lambda m}$), donde los operadores $p_{\rho m}$ y $p_{\lambda m}$, (de momento angular 1 y paridad negativa) están relacionados con los grados de libertad dipolares de cada una de las componentes de las coordenadas de Jacobi [9]. Como siempre, el bosón s tiene momento angular *cero* y paridad positiva, e introduce el corte en el espectro de los Hamiltonianos de $U_R(7)$. Esto debido a que el número total de bosones $n_s + n_{p_\rho} + n_{p_\lambda} = N_R$ debe permanecer constante. La suma del número de bosones p_ρ y p_λ puede variar entre 0 y el valor del corte N_R .

En el grupo $U_R(7)$ existen dos cadenas dinámicas frecuentemente utilizadas para la descripción de los movimientos asociados con las coordenadas ρ y λ . En estas cadenas el Hamiltoniano asociado tiene una expresión analítica para sus energías. Estas cadenas están dadas en términos de las siguientes expresiones:

$$\begin{aligned}U_R(7) &\supset SO_\lambda(4) \otimes U_\rho(3) \supset SO_\lambda(3) \otimes SO_\rho(3) \supset SO(3) \quad (I) \\ U_R(7) &\supset U_\lambda(3) \otimes U_\rho(3) \supset SO_\lambda(3) \otimes SO_\rho(3) \supset SO(3) \quad (II)\end{aligned}\quad (4.3)$$

El modelo para las moléculas nucleares de tres cúmulos utilizando este grupo unitario puede considerarse como el análogo del modelo propuesto por Iachello [40], para el caso de dos núcleos.

Existe otra posibilidad para la descripción algebraica asociada con los grados de libertad dipolares de las coordenadas ρ y λ , que considera una estructura de grupos

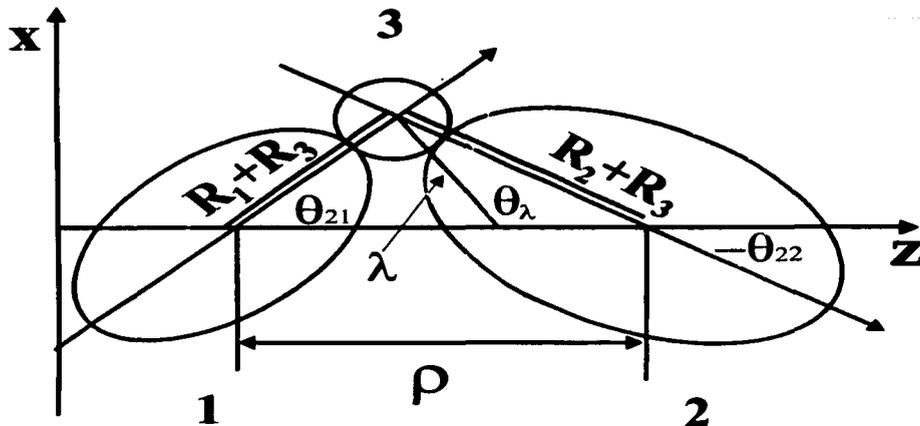


Figura 4.1: Diagrama de una molécula nuclear de tres cúmulos, definida respecto al sistema de referencia intrínseco de la molécula. En este sistema el eje z conecta los centros de masa de los núcleos pesados y el eje x, perpendicular al eje z, dirigido hacia arriba en el plano de esta figura.

$U_\rho(4) \otimes U_\lambda(4)$, donde, de manera análoga al caso de moléculas de dos cúmulos, cada uno de los grupos $U_i(4)$ permite describir el movimiento relativo de cada una de las coordenadas de Jacobi del problema [16, 72].

En la extensión de nuestro modelo algebraico al caso de moléculas nucleares de tres cúmulos, considerando cualquiera de los dos grupos anteriores ($U_R(7)$ o $U_\rho(4) \otimes U_\lambda(4)$), el procedimiento es el mismo. Esto, debido a que todos los acoplamientos se efectúan a nivel de los grupos $SU_i(3)$ ($i = \rho, \lambda$).

En este procedimiento primero se considera el acoplamiento de los núcleos más pesados, después este subsistema se acopla con el movimiento relativo de sus centros de masa descrito por la coordenada de Jacobi ρ (como en el caso de las moléculas de dos cúmulos). Posteriormente, se vuelve a considerar el acoplamiento de este nuevo subsistema, como una sola unidad, con el tercer núcleo (el núcleo ligero de la molécula). Finalmente, el sistema resultante se acopla con el movimiento relativo del tercer núcleo respecto al centro de masa de los dos núcleos pesados, descrito por la coordenada λ . El procedimiento considerado para los diferentes acoplamientos se muestra de manera

esquemática en la figura (4.2).

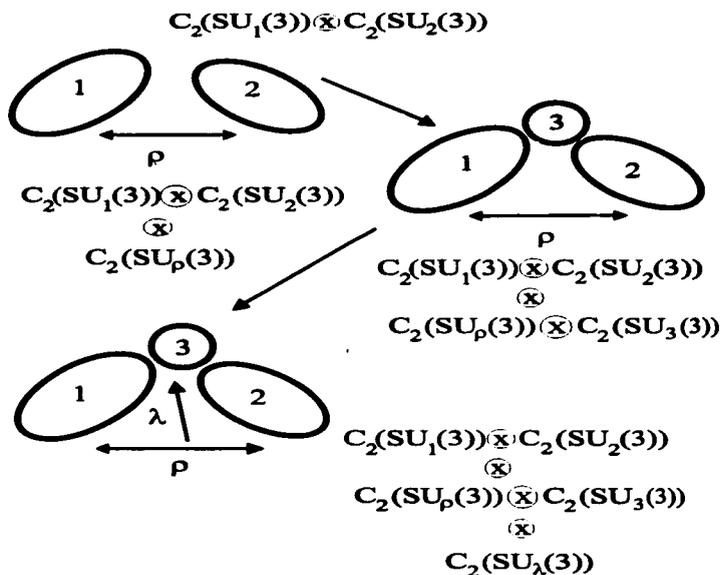


Figura 4.2: Acoplamientos considerados para la extensión del modelo de dos cúmulos al caso de moléculas de tres cúmulos.

Por simplicidad el modelo para moléculas de dos cúmulos se extiende al caso de tres cúmulos considerando un sólo grupo unitario para la descripción de los movimientos relativos de los núcleos de la molécula. Es decir, se considera el caso del grupo $U_R(7)$.

La forma de introducir la estructura interna de los cúmulos en este modelo resulta una simple extensión del modelo algebraico con estructura interna para dos cúmulos. Para esto se considera el siguiente grupo de simetría para el sistema molecular de tres núcleos; $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_{C_3}(6) \otimes U_R(7)$. Aquí el grupo $U_R(7)$ está asociado con los grados de libertad de las coordenadas ρ y λ y los grupos $U_{C_i}(6)$ están asociados con el grupo de simetría del modelo IBM, utilizado para describir la estructura interna de cada núcleo (en su versión apropiada a cada caso).

Para el grupo de simetría G existen muchas posibles cadenas dinámicas que contienen a los subgrupos de las cadenas (4.3), para el movimiento relativo de los núcleos. Debido a la experiencia adquirida con el modelo algebraico para moléculas nucleares de dos núcleos, se utilizará la cadena dinámica equivalente a aquella dada por la ecuación (3.52), para el caso de tres núcleos, i.e:

$$\begin{aligned}
 U(6)_{C_1} \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_{C_3}(6) \otimes U_R(7) &\supset SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \\
 [N_1] \quad [N_2] \quad [N_3] \quad [N_R] &\quad (\lambda_1, \mu_1) \quad (\lambda_2, \mu_2) \\
 \otimes SU_{C_3}(3) \otimes SU_\rho(3) \otimes SU_\lambda(3) &\supset [SU_{C_{12}}(3) \otimes SU_\rho(3)] \\
 (\lambda_3, \mu_3) \quad (n_\rho, 0) \quad (n_\lambda, 0) &\quad (\lambda_{12}, \mu_{12}) \bar{\rho}_{C_{12}} \quad (n_\rho, 0) \\
 \otimes SU_{C_3}(3) \otimes SU_\lambda(3) &\supset [SU_{C_{12\rho}}(3) \otimes SU_{C_3}(3)] \otimes SU_\lambda(3) \supset \\
 (\lambda_3, \mu_3) \quad (n_\lambda, 0) &\quad (\lambda_{C_{12\rho}}, \mu_{C_{12\rho}}) \bar{\rho}_{C_{12\rho}} \quad (\lambda_3, \mu_3) \quad (n_\lambda, 0) \\
 \supset SU_{C_{T\rho}}(3) \otimes SU_\lambda(3) \supset SU(3) &\supset SO(3) \\
 (\lambda_{C_{T\rho}}, \mu_{C_{T\rho}}) \bar{\rho}_{C_{T\rho}} \quad (n_\lambda, 0) \quad (\lambda, \mu) \bar{\rho} &\quad \kappa L \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

Aquí, N_i corresponde al número total de bosones en el modelo IBM para cada irrep de los grupos $U(6)$ de los tres núcleos; n_ρ y n_λ representan el número total de bosones asociados con el movimiento relativo; (λ_i, μ_i) corresponde a las representaciones irreducibles de $SU(3)$ del i -ésimo cúmulo, (λ_{12}, μ_{12}) corresponde a las representaciones irreducibles de $SU(3)$ a las que los cúmulos 1 y 2 pueden acoplarse; $(\lambda_{C_{12\rho}}, \mu_{C_{12\rho}})$ corresponde a las representaciones irreducibles de $SU_{C_{12\rho}}(3)$ a las que los cúmulos 1 y 2, acoplados previamente, pueden acoplarse con la irrep $(n_\rho, 0)$ del grupo $SU_\rho(3)$, $(\lambda_{C_{T\rho}}, \mu_{C_{T\rho}})$ corresponde a las representaciones irreducibles de $SU_{C_{T\rho}}(3)$ que resultan de acoplar el grupo $SU_{C_{12\rho}}(3)$ con la irrep (λ_3, μ_3) del grupo $SU_{C_3}(3)$; (λ, μ) corresponde a la representación irreducible del grupo total $SU(3)$; L es el momento angular; $\bar{\rho}_{C_{12}}$, $\bar{\rho}_{C_{12\rho}}$, $\bar{\rho}_{C_{T\rho}}$, $\bar{\rho}$ y κ representan los diferentes índices de multiplicidad. El valor del número cuántico κ nuevamente puede considerarse, de manera aproximada, como la proyección del momento angular L en el eje intrínseco z de la molécula [62].

En esta propuesta para el Hamiltoniano se ha considerado que las interacciones cuadrupolares del tipo $Q_i \cdot Q_j$, que aparecen en el hamiltoniano asociado a la cadena dinámica (4.4) en sus diferentes grupos $SU(3)$, resultan ser las más importantes para el caso de moléculas nucleares con núcleos bien deformados.

El Hamiltoniano asociado a la cadena dinámica (4.4) puede escribirse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned}
H = & \chi_1 C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_2 C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_3 C_2(SU_{C_3}(3)) + \\
& + \chi_{12} C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_\rho C_2(SU_\rho(3)) + \epsilon_\rho n_\rho \\
& + \chi_\lambda C_2(SU_\lambda(3)) + \epsilon_\lambda n_\lambda + \chi_{C_{12\rho}} C_2(SU_{C_{12\rho}}(3)) + \chi_{C_{T\rho}} C_2(SU_{C_{T\rho}}(3)) + \\
& + \chi_T C_2(SU(3)) + \chi_{N_\rho} (C_2(SU_{C_{12}}(3)) - \langle C_2(SU_{C_{12}}(3)) \rangle_{\theta_0}) n_\rho \\
& + \chi_{N_\lambda} (C_2(SU_{C_{T\rho}}(3)) - \langle C_2(SU_{C_{12}}(3)) \rangle_{\theta_0}) n_\lambda + aL^2 + cK^2, \quad (4.5)
\end{aligned}$$

donde los valores de los parámetros χ corresponden a las diferentes constantes de rigidez de las interacciones cuadrupolo-cuadrupolo, L^2 es el operador de momento angular y K^2 es el operador introducido con anterioridad [62] cuyo valor propio es, aproximadamente, la proyección del momento angular en el eje intrínseco molecular.

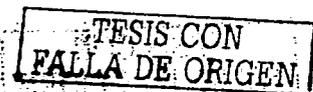
En el Hamiltoniano (4.5) nuevamente hemos considerado términos de la forma $\chi_{N_i} (C_2(SU_{C_{12}}(3)) - \langle C_2(SU_{C_{12}}(3)) \rangle_{\theta_0}) n_i$, de manera totalmente análoga al caso de dos cúmulos. Estos operadores desempeñan un papel importante al ajustar los potenciales mapeados con los potenciales de "doble-convolución" para diferentes orientaciones de los ejes de simetría de los núcleos.

Los valores propios del Hamiltoniano (4.5) respecto a la base definida por la cadena dinámica (4.4) están dados, hasta una constante aditiva, por la expresión:

$$\begin{aligned}
E = & \chi_1(\lambda_1^2 + \mu_1^2 + \lambda_1\mu_1 + 3(\lambda_1 + \mu_1)) + \chi_2(\lambda_2^2 + \mu_2^2 + \lambda_2\mu_2 + 3(\lambda_2 + \mu_2)) + \\
& + \chi_3(\lambda_3^2 + \mu_3^2 + \lambda_3\mu_3 + 3(\lambda_3 + \mu_3)) + \\
& + \chi_{12}(\lambda_{12}^2 + \mu_{12}^2 + \lambda_{12}\mu_{12} + 3(\lambda_{12} + \mu_{12})) + \\
& + \chi_{C_{12\rho}}(\lambda_{12\rho}^2 + \mu_{12\rho}^2 + \lambda_{12\rho}\mu_{12\rho} + 3(\lambda_{12\rho} + \mu_{12\rho})) + \\
& + \chi_{C_{T\rho}}(\lambda_{C_{T\rho}}^2 + \mu_{C_{T\rho}}^2 + \lambda_{C_{T\rho}}\mu_{C_{T\rho}} + 3(\lambda_{C_{T\rho}} + \mu_{C_{T\rho}})) + \\
& + \chi_\rho(n_\rho^2 + 3n_\rho) + \chi_\lambda(n_\lambda^2 + 3n_\lambda) + \\
& + \epsilon_\rho n_\rho + \epsilon_\lambda n_\lambda \\
& + \chi_T(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu + 3(\lambda + \mu)) \\
& + \chi_{N_\rho}(\lambda_{12}^2 + \mu_{12}^2 + \lambda_{12}\mu_{12} + 3(\lambda_{12} + \mu_{12}) - \langle C_2(SU_{C_{12}}(3)) \rangle_{\theta_0}) n_\rho \\
& + \chi_{N_\lambda}(\lambda_{C_{T\rho}}^2 + \mu_{C_{T\rho}}^2 + \lambda_{C_{T\rho}}\mu_{C_{T\rho}} + 3(\lambda_{C_{T\rho}} + \mu_{C_{T\rho}}) - \langle C_2(SU_{C_{12}}(3)) \rangle_{\theta_0}) n_\lambda \\
& + aL(L+1) + c\kappa^2 \quad (4.6)
\end{aligned}$$

4.1.1. Conexión geométrica del modelo algebraico para moléculas de 3 cúmulos.

Cuando se considera el contenido geométrico del modelo algebraico $U_R(7)$, para moléculas nucleares sin estructura interna, se encuentra que el valor de expectación



del Hamiltoniano de este modelo presenta un mínimo para una separación diferente de cero entre los diferentes núcleos del sistema [10, 11]. Sin embargo, este Hamiltoniano no corresponde a ninguna de las cadenas dinámicas de la ecuación (4.3).

Nuevamente, es necesario averiguar si el potencial geométrico asociado al nuevo Hamiltoniano algebraico (4.5) presenta un mínimo como función de las distancias relativas, para separaciones diferentes de cero entre los cúmulos; como es de esperarse en un potencial molecular nuclear. Con este propósito se considera el valor de expectación de este Hamiltoniano en el estado coherente de la parte relativa y de los cúmulos individuales.

Antes de calcular el valor de expectación del Hamiltoniano (4.5) es necesario considerar el contenido geométrico del movimiento relativo de los núcleos. Para esto se utiliza la técnica de los estados coherentes [56, 57, 64].

Para el caso de las moléculas nucleares de tres cúmulos es necesario considerar el sistema de coordenadas respecto al sistema de referencia molecular, definido de manera que el eje molecular z se encuentre a lo largo del vector que conecta los centros de masa de los núcleos pesados (Fig. 4.1) y el eje molecular x perpendicular al eje z localizado en el plano de la molécula, como se puede observar en la figura (4.1).

En este sistema de referencia, únicamente hay un bosón $p_{0\rho}$ para el movimiento relativo de los núcleos pesados y los bosones $p_{0\lambda}$ y $p_{x\lambda}$ para el movimiento del núcleo ligero respecto al centro de masa de los otros dos núcleos. En consecuencia, el estado coherente para el movimiento relativo de los núcleos puede expresarse como [72]:

$$|N_R, \alpha_\rho, \alpha_\lambda, \theta_\lambda \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_R!}} \left(\frac{b_C^\dagger}{\sqrt{1 + \alpha_\rho^2 + \alpha_\lambda^2}} \right)^{N_R} |0 \rangle, \quad (4.7)$$

donde:

$$b_C^\dagger = s^\dagger + \alpha_\rho p_{0\rho}^\dagger + \alpha_\lambda \left(p_{0\lambda}^\dagger \cos \theta_\lambda - \frac{1}{\sqrt{2}} (p_{+1\lambda}^\dagger - p_{-1\lambda}^\dagger) \sin \theta_\lambda \right) \quad (4.8)$$

y θ_λ corresponde al ángulo formado entre el eje molecular z y el vector $\vec{\lambda}$.

Con este estado coherente se puede calcular el valor de expectación del Hamiltoniano algebraico (4.5) para determinar si éste presenta un mínimo para separaciones relativas diferentes de cero. Para esto, nuevamente los parámetros α_{ρ_m} y α_{λ_m} del estado coherente (4.7) se deben relacionar con las distancias relativas ρ y λ .

Para relacionar los parámetros α_{ρ_m} y α_{λ_m} con las distancias ρ y λ considérese el operador algebraico para las distancias relativas (3.45):

$$r_m = \frac{\langle \mathbf{r}_m^a \rangle}{\sqrt{\langle s^\dagger s \rangle}} \quad (4.9)$$

con

$$\mathbf{r}_m^a = \rho_m^a, \lambda_m^a. \quad (4.10)$$

Calculando los valores de expectación para estas distancias (4.9) en el estado coherente (4.7), se obtienen las siguientes relaciones para las componentes esféricas de los vectores ρ_m y λ_m :

$$\begin{aligned} \frac{\rho_m}{\sqrt{2N_R b}} &= \frac{\alpha_{\rho m}}{\sqrt{(1 + \alpha_{\rho}^2 + \alpha_{\lambda}^2)}} \\ \frac{\lambda_m}{\sqrt{2N_R b}} &= \frac{\alpha_{\lambda m}}{\sqrt{(1 + \alpha_{\rho}^2 + \alpha_{\lambda}^2)}}, \end{aligned} \quad (4.11)$$

con

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_r}}, \quad (4.12)$$

donde b nuevamente corresponde a la longitud de oscilación característica del sistema cuantizado respecto al oscilador armónico del grupo $U_R(7)$ de frecuencia angular ω_r .

Debido a que las variables α_i ($i = \rho, \lambda$) varían entre 0 y ∞ , las distancias relativas ρ y λ varían entre 0 y un valor máximo $\sqrt{2N_R}b$. Para poder describir una molécula nuclear, los valores de ω_r y N_R deben ser tales que ρ y λ varíen entre 0 y una cierta distancia, varios fermis por encima de la distancia en donde cualquier par de núcleos de la molécula se alcanzan a tocar. Esto implica considerar un valor de N_R suficientemente grande.

El estado coherente total con el que se calculó el valor esperado del Hamiltoniano (4.5), está dado por el producto directo de los estados coherentes de los tres núcleos, dados por la expresión (3.58) y el correspondiente al movimiento relativo de estos, dado por la expresión (4.7). El valor de expectación de este Hamiltoniano resulta ser (calculado para estados con $L = 0$ y $\kappa = 0$):

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \chi_1 \left[10N_1 + \frac{4N_1(N_1 - 1)\beta_1^2}{(1 + \beta_1^2)^2} \left[2 \pm \sqrt{2}\beta_1 + \frac{1}{4}\beta_1^2 \right] \right] \\ &+ \chi_2 \left[10N_2 + \frac{4N_2(N_2 - 1)\beta_2^2}{(1 + \beta_2^2)^2} \left[2 \pm \sqrt{2}\beta_2 + \frac{1}{4}\beta_2^2 \right] \right] \\ &+ (\chi_{12} + \chi_{12\rho} + \chi_{C_T\rho} + \chi_T) \left[10N_1 + \frac{4N_1(N_1 - 1)\beta_1^2}{(1 + \beta_1^2)^2} \left[2 \pm \sqrt{2}\beta_1 + \frac{1}{4}\beta_1^2 \right] \right] \\ &+ 10N_2 + \frac{4N_2(N_2 - 1)\beta_2^2}{(1 + \beta_2^2)^2} \left[2 \pm \sqrt{2}\beta_2 + \frac{1}{4}\beta_2^2 \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & +(\chi_3 + \chi_{C_{T\rho}} + \chi_T)[10N_3 + \frac{4N_3(N_3 - 1)\beta_3^2}{(1 + \beta_3^2)^2}[2 \pm \sqrt{2}\beta_3 + \frac{1}{4}\beta_3^2]] \\
 & +(\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_{C_{T\rho}} + \chi_T)[(\frac{N_R - 1}{N_R})(\frac{\rho^2}{2b^2})^2 + (\frac{2\rho^2}{b^2})] + \epsilon_\rho(\frac{\rho^2}{2b^2})^2 \\
 & +(\chi_\lambda + \chi_T)[(\frac{N_R - 1}{N_R})(\frac{\lambda^2}{2b^2})^2 + (\frac{2\lambda^2}{b^2})] + \epsilon_\lambda(\frac{\lambda^2}{2b^2})^2 \\
 & +(\chi_{12} + \chi_{12\rho} + \chi_{C_{T\rho}} + \chi_T)\frac{8N_1N_2\beta_1\beta_2}{(1 + \beta_1^2)(1 + \beta_2^2)}[1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}] \\
 & (3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1) \\
 & +\chi_T\frac{8N_3\beta_3}{(1 + \beta_3^2)}[1 \pm \frac{\beta_3}{2\sqrt{2}}][\frac{N_1\beta_1}{(1 + \beta_1^2)}[1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{23}) - 1) \\
 & +\frac{N_2\beta_2}{(1 + \beta_2^2)}[1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{22} - \theta_{23}) - 1)] \\
 & +\frac{\sqrt{2}(\chi_{12\rho} + \chi_{C_{T\rho}} + \chi_T)\rho^2}{b^2}[\frac{N_1\beta_1}{1 + \beta_1^2}[1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{21}) - 1) \\
 & +\frac{N_2\beta_2}{1 + \beta_2^2}[1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{22}) - 1)] \\
 & +\frac{\sqrt{2}(\chi_{C_{T\rho}} + \chi_T)\rho^2 N_3\beta_3}{b^2(1 + \beta_3^2)}[1 \pm \frac{\beta_3}{2\sqrt{2}}](3\cos^2\theta_{23} - 1) \\
 & +\frac{\sqrt{2}\chi_T\lambda^2}{b^2}[\frac{N_1\beta_1}{(1 + \beta_1^2)}(3\cos^2(\theta_{21} + \theta_\lambda) - 1) \\
 & +\frac{N_2\beta_2}{(1 + \beta_2^2)}(3\cos^2(\theta_{22} + \theta_\lambda) - 1) \\
 & +\frac{N_3\beta_3}{(1 + \beta_3^2)}(3\cos^2(\theta_{23} + \theta_\lambda) - 1)] \\
 & +\chi_T\left(\frac{N_R - 1}{N_R}\right)\left(\frac{\rho^2\lambda^2}{4b^2}\right)(3\cos^2(\theta_\lambda) - 1) \\
 & +\chi_{N\rho}\frac{\rho^2}{b^2}\frac{4N_1N_2\beta_1\beta_2}{(1 + \beta_1^2)(1 + \beta_2^2)}[1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}] \\
 & [(3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1) - (3\cos^2(\theta_{21_0} - \theta_{22_0}) - 1)] \\
 & +\chi_{N\lambda}\frac{\lambda^2}{b^2}\frac{4N_1N_2\beta_1\beta_2}{(1 + \beta_1^2)(1 + \beta_2^2)}[1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}] \\
 & [(3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1) - (3\cos^2(\theta_{21_0} - \theta_{22_0}) - 1)]
 \end{aligned}$$

(4.13)

Nuevamente, en el caso en que se considera la molécula nuclear sin deformación de los núcleos ($\beta_i = 0, i=1,2,3$) únicamente los términos positivos en ρ^2 , λ^2 y ρ^4 , λ^4 aparecerán en el potencial mapeado de la molécula. También los términos ϵ_ρ y ϵ_λ proporcionales

a ρ^2 y λ^2 respectivamente, que pueden ser positivos o negativos. En esta situación es posible ajustar el potencial internuclear para una cierta orientación de los núcleos de la molécula, pero el modelo no permitiría reproducir el potencial internuclear para otras orientaciones diferentes, por lo que no es posible extraer la información adicional contenida en el potencial internuclear. Pero, si se considerará la deformación de los núcleos, alguna información adicional del potencial puede tomarse en consideración para determinar los parámetros del Hamiltoniano (4.5).

4.2. Aplicación del modelo algebraico para moléculas de tres cúmulos a la molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$.

4.2.1. Ajuste del potencial mapeado al potencial calculado mediante el método de "doble-convolución" para la molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$.

En este caso el propósito es obtener los espectros de energía de la molécula nuclear considerando configuraciones de equilibrio lineales y triangulares.

Para obtener espectros característicos de moléculas de tres núcleos, se seguirá un procedimiento análogo al considerado en el capítulo 3, para el caso de moléculas nucleares de dos cúmulos. Es decir, obtener restricciones para los valores de los parámetros del Hamiltoniano (4.5), partiendo de reproducir con el potencial mapeado del Hamiltoniano algebraico los potenciales internucleares de "doble-convolución". Esto debido a que hasta la fecha no hay información experimental del espectro de esta molécula.

Para el caso de moléculas nucleares de tres cúmulos, los potenciales de "doble-convolución" serán algo diferentes a los considerados para las moléculas de dos cúmulos. Esto se debe a que en el presente caso no es posible obtener de manera general un potencial de "doble-convolución" en las coordenadas relativas (ρ, λ) , por lo que los potenciales se limitarán a una aproximación armónica de la forma:

$$V(\rho, \lambda) = \frac{C_\lambda}{2} (\lambda - \lambda_0)^2 + \frac{C_\rho}{2} (\rho - \rho_0)^2 \quad , \quad (4.14)$$

donde los valores de las curvaturas C_λ y C_ρ se determinan de los potenciales generales de "doble-convolución" en los valores del mínimo del potencial para las coordenadas relativas $\lambda = \lambda_0$ y $\rho = \rho_0$. Los detalles del cálculo de los coeficientes C_λ y C_ρ puede consultarse en el apéndice 1.

Para reproducir el potencial internuclear de la ecuación (4.14), con el potencial mapeado (4.13), la primera aproximación que se tomará en cuenta será considerar al núcleo ^{10}Be como esférico, porque su extensión es considerablemente menor que la extensión de

los núcleos pesados. En este caso se puede tomar el parámetro $\chi_{CT\rho}$ del Hamiltoniano (4.5) igual a cero, porque no existe ninguna diferencia entre las irreps de los grupos $SU_{12\rho}(3)$ y $SU_{CT\rho}(3)$ ya que la irrep del núcleo ligero, considerado por ahora como esférico, será $(\lambda_3, \mu_3) = (0, 0)$ y entonces $(\lambda_{12\rho}, \mu_{12\rho}) = (\chi_{CT\rho}, \mu_{CT\rho})$.

Para encontrar los valores de los parámetros del Hamiltoniano (o restricciones para los mismos), de aquellos parámetros relacionados con el movimiento relativo de los núcleos y la dependencia con las orientaciones relativas de los ejes de simetría de los núcleos pesados respecto al eje molecular z, se deben reproducir algunas características del potencial (4.14) como pueden ser las siguientes.

Primero:

$$\begin{aligned} \frac{\partial V(\rho, \lambda)}{\partial \rho} \Big|_{\{\theta_i = \theta_{i0}\}, \rho_0, \lambda_0} &= 0 \\ \frac{\partial V(\rho, \lambda)}{\partial \lambda} \Big|_{\{\theta_i = \theta_{i0}\}, \rho_0, \lambda_0} &= 0 \end{aligned}$$

que es necesaria para que ambos potenciales presenten su mínimo en la misma orientación y posición en las variables del movimiento relativo (ρ, λ) .

La segunda condición que se considera, es que el potencial mapeado presente la misma curvatura que el potencial de "doble-convolución" en la posición del mínimo $\rho = \rho_0, \lambda = \lambda_0, \{\theta_i = \theta_{i0}\}$:

$$\begin{aligned} C_\rho &= \frac{\partial^2 V}{\partial \rho^2} \Big|_{\{\theta_i = \theta_{i0}\}, \rho_0, \lambda_0} = \frac{2(\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_T)\rho_0^2}{b^4} \\ C_\lambda &= \frac{\partial^2 V}{\partial \lambda^2} \Big|_{\{\theta_i = \theta_{i0}\}, \rho_0, \lambda_0} = \frac{2(\chi_\lambda + \chi_T)\lambda_0^2}{b^4} \end{aligned}$$

La tercera condición considerada, es que el valor de expectación de los operadores de número n_{p_ρ} y n_{p_λ} en el estado coherente $|N_R, \alpha_\rho, \alpha_\lambda, \theta_\lambda\rangle$, para las distancias $\rho = \rho_0, \lambda = \lambda_0$ y orientaciones $\{\theta_i = \theta_{i0}\}$, resulten igual al valor del número de excitaciones relativas n_{ρ_0} y n_{λ_0} para las que la energía (4.6) de la molécula trinuclear resulta ser mínima como función de n_ρ y n_λ , i.e:

$$\begin{aligned} \frac{\rho_0^2}{2b^2} &= n_{\rho_0} = \langle N_R, \alpha_\rho, \alpha_\lambda, \theta_\lambda | p_\rho^\dagger \cdot p_\rho | N_R, \alpha_\rho, \alpha_\lambda, \theta_\lambda \rangle \\ \frac{\lambda_0^2}{2b^2} &= n_{\lambda_0} = \langle N_R, \alpha_\rho, \alpha_\lambda, \theta_\lambda | p_\lambda^\dagger \cdot p_\lambda | N_R, \alpha_\rho, \alpha_\lambda, \theta_\lambda \rangle. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Finalmente, como cuarta condición, se puede utilizar alguna información adicional del potencial para otra orientación relativa de los núcleos pesados respecto del eje molecular, por ejemplo: forzar al potencial mapeado a que este presente un mínimo en la

orientación considerada, y que corresponda a separaciones relativas ρ'_0 , λ'_0 para las que los tres cúmulos se encuentren apenas en contacto entre ellos, i.e:

$$\left. \frac{\partial V(\rho, \lambda)}{\partial \rho} \right|_{\{\theta_i = \theta'_{i0}\}, \rho'_0, \lambda'_0} = 0$$

$$\left. \frac{\partial V(\rho, \lambda)}{\partial \lambda} \right|_{\{\theta_i = \theta'_{i0}\}, \rho'_0, \lambda'_0} = 0,$$

Para satisfacer esta última condición fue necesario considerar los términos proporcionales a $\chi_{N\rho}$ y $\chi_{N\lambda}$ en el Hamiltoniano, porque si no se consideran estos términos se obtiene una contradicción entre la cuarta condición y las primeras tres condiciones.

Considerando las cuatro condiciones anteriores, finalmente se obtiene una relación entre los parámetros χ_T y $\chi_{N\lambda}$, de la forma:

$$f(\chi_{N\lambda}, \chi_T) = 0,$$

donde se pueden obtener diferentes ramas de las soluciones de los parámetros χ_T y $\chi_{N\lambda}$ dependiendo de los valores de los parámetros $(\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_T)$, $(\chi_\lambda + \chi_T)$, n_{λ_0} y n_{μ_0} , para los que las soluciones positivas de estos parámetros son las únicas de interés físico, al igual que en el caso de dos cúmulos.

4.2.2. Molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ en una Configuración Triangular.

Es posible obtener algunas características generales del espectro molecular del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$, considerando las condiciones de la sección anterior, para el caso en que la molécula se encuentra en una configuración geométrica de equilibrio triangular, donde los núcleos pesados presentan interacciones entre sí y con el núcleo ligero, que se encuentra en el vértice superior del triángulo apenas en contacto en su superficie con los núcleos pesados (ver figura 4.1).

Para una configuración triangular, por sencillez, consideramos el caso simétrico para los ángulos de inclinación de los ejes de simetría de los núcleos ^{96}Sr y ^{146}Ba ($\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$), respecto al eje molecular z , que se encuentra a lo largo de la línea que une los centros de masa de los núcleos pesados.

Tomando los valores de los parámetros del modelo IBM para los núcleos ^{96}Sr y ^{146}Ba dados por la ecuación(3.77) se obtiene la expresión para el potencial internuclear $V(\rho, \lambda)$:

$$V(\rho, \lambda) = (\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_T) \left(\frac{\rho^2}{2b^2} \right)^2$$

$$+ [4(\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_T)) + 57.199(\chi_{12\rho} + \chi_T) + \epsilon_\rho] \left(\frac{\rho^2}{2b^2} \right)$$

$$\begin{aligned}
 & +(\chi_\lambda + \chi_T) \left(\frac{\lambda^2}{2b^2} \right)^2 + [4(\chi_\lambda + \chi_T)] + 9.035\chi_T + \epsilon_\lambda \left(\frac{\lambda^2}{2b^2} \right) \\
 & + 0.321\chi_T \left(\frac{\lambda\rho}{2b^2} \right)^2 + 310(\chi_{12\rho} + \chi_{12} + \chi_T) + const \quad , \quad (4.16)
 \end{aligned}$$

donde en la constante aditiva se encuentran considerados aquellos términos que sólo dependen de la estructura de los núcleos individuales.

En este caso se puede intentar ajustar los parámetros del Hamiltoniano (4.5) imponiendo para la cuarta condición de la sección anterior, el hecho de que el potencial mapeado presente también un mínimo para una configuración lineal de la molécula trinuclear, donde, $\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$ y $\theta_\lambda = 0^\circ$. En este caso los valores permitidos de los parámetros que aparecen en el potencial (4.16) se muestran en la figura 4.3.

Aunque las cuatro condiciones no permiten determinar de manera única los parámetros del Hamiltoniano, si permiten reproducir de manera satisfactoria las características generales del potencial de "doble-convolución" en las cercanías del mínimo.

En la figura 4.3 pueden observarse las diferentes combinaciones de los parámetros $\{\chi'_S\}$, que determinan la estructura específica del espectro de energía de la molécula nuclear. Además se observa que las combinaciones $\chi_{12\rho} + \chi_T$, $\chi_{N\rho}$ y $\chi_T + \chi_{12\rho} + \chi_{12}$ presentan un comportamiento prácticamente constante. Esto resulta en una estructura del espectro de energía molecular fija para las excitaciones asociadas con estas combinaciones de los parámetros del Hamiltoniano algebraico.

Sin embargo, otros parámetros como es el caso de los parámetros ϵ_ρ y ϵ_λ , disminuyen su valor muy rápidamente conforme disminuye el valor de $\chi_{N\lambda}$. Sin embargo, estos parámetros afectan muy poco la estructura general de los espectros de energía de la molécula nuclear de tres cúmulos.

Por lo tanto, los espectros moleculares que pueden obtenerse determinando los parámetros del modelo con el mapeo geométrico del Hamiltoniano, presentarán la misma estructura para las bandas vibracionales y rotacionales, para diferentes conjuntos de parámetros $\{\chi'_S\}$ en diferentes escalas de energía.

Los potenciales que resultan al considerar las restricciones anteriores se muestran en la figura 4.4 para la coordenada ρ y en la figura 4.5 para la coordenada λ . En el primer caso se ha graficado $V(\rho, \lambda = \lambda_0)$ donde λ_0 es el valor de λ en el mínimo del potencial para la configuración triangular o lineal. En el caso de la figura 4.5 se ha graficado $V(\rho = \rho_0, \lambda)$ donde ρ_0 es el valor de ρ en el mínimo del potencial en la configuración triangular o lineal, dependiendo de la orientación relativa de los núcleos pesados que se considera.

El espectro de energía obtenido no se encuentra determinado de manera única debido a las restricciones encontradas para los parámetros. Sin embargo, es posible calcular los espectros de energía que resultan para diferentes conjuntos de valores de parámetros $\{\chi'_S\}$, como se muestra en la figura 4.6 para los valores de los parámetros dados en la siguiente tabla:

$$\begin{aligned}
 \chi_\rho &= 1.3709 \text{ MeV} \\
 \chi_T &= -1.1925 \text{ MeV} \\
 \chi_{12\rho} &= 0.9198 \text{ MeV} \\
 \chi_\lambda &= 60.071 \text{ MeV} \\
 \varepsilon_\rho &= -365.732 \text{ MeV} \\
 \varepsilon_\lambda &= -102.684 \text{ MeV} \\
 \chi_{N_\rho} &= 0.00713 \text{ MeV} \\
 \chi_{N_\lambda} &= -0.289 \text{ MeV} \\
 \chi_{12} &= 3.039 \text{ MeV} \\
 n_{\rho_0} &= 49 \\
 n_{\lambda_0} &= 1 \\
 a &= 0.00104 \text{ MeV} \\
 c &= 0 \cdot \text{MeV} \\
 b &= 1.883 \text{ fm.}
 \end{aligned} \tag{4.17}$$

En la figura 4.6 se han indicado las irreps de los diferentes acoplamientos considerados en el modelo; (λ_C, μ_C) corresponde al acoplamiento de las estructura internas de los núcleos entre sí, n_ρ y n_λ corresponden al número de vibraciones en los movimientos relativos, (λ, μ) representa las irreps totales que resultan de considerar los diferentes acoplamientos para la molécula trinuclear, y L^π representan el momento angular y la paridad del estado de menor energía de cada banda vibracional.

El parámetro a se ha calculado del momento de inercia para esta molécula dado por [8]:

$$a = \frac{\hbar^2}{2(\mu_{12}\rho_0^2 + \mu_{(12)3}\lambda_0^2)} \quad , \tag{4.18}$$

donde μ_{12} es la masa reducida de los núcleos pesados, y $\mu_{(12)3}$ es la masa reducida de las masas μ_{12} y la masa m_3 del núcleo ligero (en este caso el ^{10}Be). El parámetro c , como se mencionó anteriormente, no puede determinarse del potencial geométrico.

En el espectro de energía de la figura 4.6 se observa la posibilidad de obtener espectros con características similares a las obtenidas en los modelos geométricos para moléculas nucleares de tres cúmulos en configuraciones lineales. Nótese que los espectros de energía presentan una separación clara entre las bandas vibracionales y los estados rotacionales de cualquier banda vibracional, estos últimos se encuentran en la escala de los keV 's [6].

La estructura anterior para el espectro del sistema $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$, es muy diferente de la estructura de los espectros de las molécula nuclear de núcleos ligeros; como la

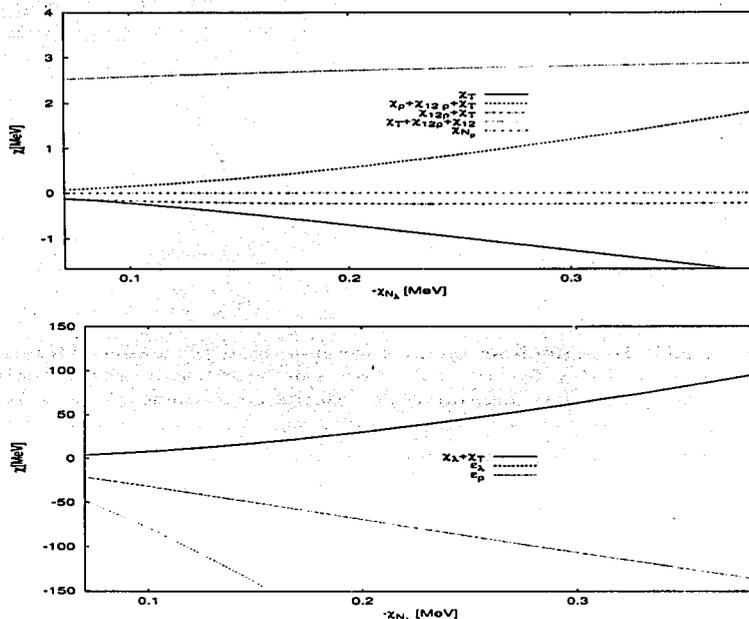


Figura 4.3: Valores permitidos para los parámetros del Hamiltoniano (4.5), obtenidos al reproducir con el potencial mapeado las principales características del potencial de “doble-convolución”.

molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, en donde la separación entre los estados rotacionales de una banda vibracional y la separación entre bandas vibracionales resulta ser del mismo orden en energía.

La estructura del espectro para la molécula $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$ también resulta muy diferente, comparada con el caso de la hipotética molécula nuclear $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$, donde la separación entre los estados rotacionales de una banda vibracional se encuentra en la escala de los keV 's y la separación en energía entre bandas vibracionales resulta ser del

TESIS CON FALLA DE ORIGEN

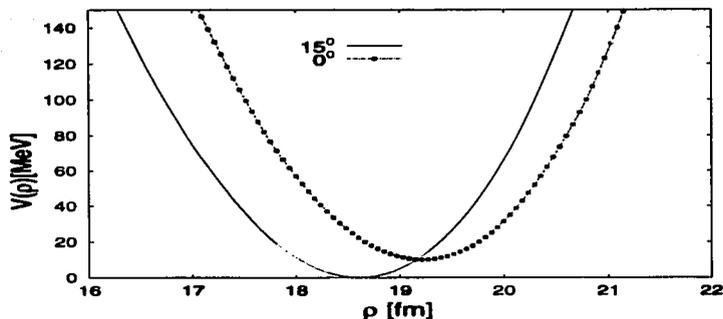


Figura 4.4: Potencial internuclear en la coordenada ρ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$ y $\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$, que resulta de reproducir las cuatro condiciones del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula ${}^{96}\text{Sr} + {}^{10}\text{Be} + {}^{146}\text{Ba}$.

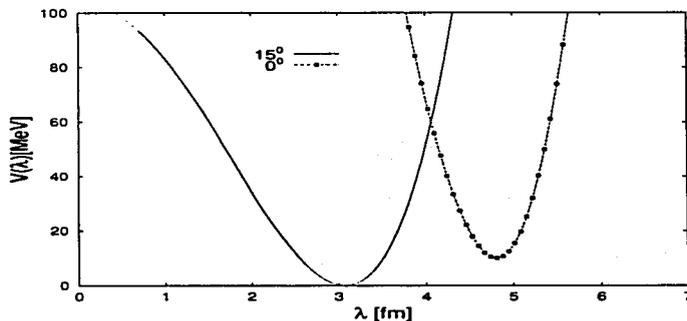


Figura 4.5: Potencial internuclear en la coordenada λ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$ y $\theta_{21} = -\theta_{22} = 0^\circ$, que resulta de reproducir las cuatro condiciones del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula ${}^{96}\text{Sr} + {}^{10}\text{Be} + {}^{146}\text{Ba}$.

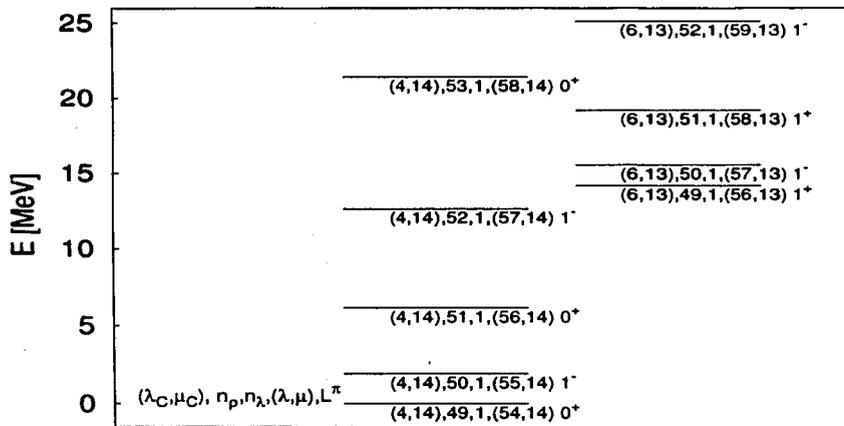


Figura 4.6: Espectro de energía para la molécula $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$ obtenido al reproducir el potencial armónico de “doble-convolución” para esta molécula. En la figura únicamente se muestran las cabezas de las bandas vibracionales, debido a que las bandas rotacionales se encuentran en una escala de energías mucho menor.

orden de algunas décimas de MeV. Esta diferencia se debe, en parte, a que el momento de inercia en el sistema de núcleos pesados $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$ es mucho mayor que en el caso de moléculas nucleares de dos cúmulos. Pero también deben existir otros efectos debidos a la presencia del tercer núcleo, que resultan en un incremento en la separación de la energía de las bandas vibracionales. Esto puede verse al comparar la separación energética de las bandas vibracionales para el caso de moléculas nucleares de dos cúmulos pesados (figura 3.14) y el caso de moléculas nucleares de tres cúmulos (figura 4.6).

Al considerar la estructura de las primeras bandas vibracionales excitadas, puede verse que el acoplamiento de las irreps de los diferentes grupos $SU(3)$, resulta muy similar al obtenido en el caso de la hipotética molécula nuclear $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$.

4.2.3. Molécula nuclear de tres cúmulos en una configuración lineal

En esta sección se analiza el caso en que la molécula nuclear $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$ se encuentra en una configuración geométrica de equilibrio de tipo lineal, similar al de la figura 2.6, con las distancias relativas y orientaciones definidas de igual forma que en el caso triangular (figura 4.1).

En esta configuración de equilibrio los núcleos pesados no presentan una interacción directa entre ellos y sólo interactúan cada uno de ellos con el núcleo ligero. Este último se encuentra en medio de los núcleos pesados apenas en contacto en su superficie con sus núcleos vecinos, todos ellos alineados a lo largo del eje molecular z .

Cuando se intenta reproducir el potencial internuclear (4.14) para este tipo de configuraciones aparecen algunos problemas de consistencia. Estos se refieren a las representaciones irreducibles de los grupos $SU_{C_{12\rho}}(3)$ y $SU(3)$ total, que se consideran "a priori" como aquellas que corresponden a los valores n_{ρ_0} y n_{λ_0} para los que la energía de la molécula (4.6) resulta ser mínima.

Porque, una vez que se ajusta el potencial y se encuentran las restricciones para los parámetros $\{\chi_S\}$ del Hamiltoniano del modelo, resulta que para las irreps de los grupos $SU_{C_{12\rho}}(3)$ y $SU(3)$ consideradas inicialmente, los valores de n_{ρ_0} y n_{λ_0} no producen un mínimo absoluto para la energía de la molécula. De manera que se tiene una inconsistencia para la obtención de los espectros característicos de la molécula trinuclear en una configuración de equilibrio lineal.

Estas inconsistencias se presentan para las combinaciones de los parámetros χ_T , $\chi_{12\rho} + \chi_T + \chi_{12} + \chi_{12\rho} + \chi_T$, porque cuando estos resultan positivos, para producir un mínimo necesariamente tendrían que ser negativos y viceversa, impidiendo así obtener consistencia entre las cuatro condiciones impuestas para el potencial mapeado y los valores de n_{ρ_0} y n_{λ_0} considerados inicialmente.

Sin embargo, es posible evitar estas inconsistencias si se considera el caso de la molécula nuclear $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$, cuando ésta se encuentra en una configuración geométrica de equilibrio de tipo lineal como el de la figura 4.7. En esta configuración de equilibrio los núcleos pesados no se encuentran en contacto entre sí, y el núcleo ligero se encuentra en medio de los núcleos pesados, de manera que los centros de masa de los núcleos pesados y del ligero se encuentran a lo largo del eje molecular z , con $\theta_\lambda = 0^\circ$. Sin embargo, los ejes de simetría de los núcleos pesados están orientados simétricamente respecto al eje molecular z formando un ángulo $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$.

Tomando los valores de los parámetros de los núcleos ^{96}Sr y ^{146}Ba dados por la ecuación (3.77) se obtiene la siguiente expresión para el potencial internuclear $V(\rho, \lambda)$:

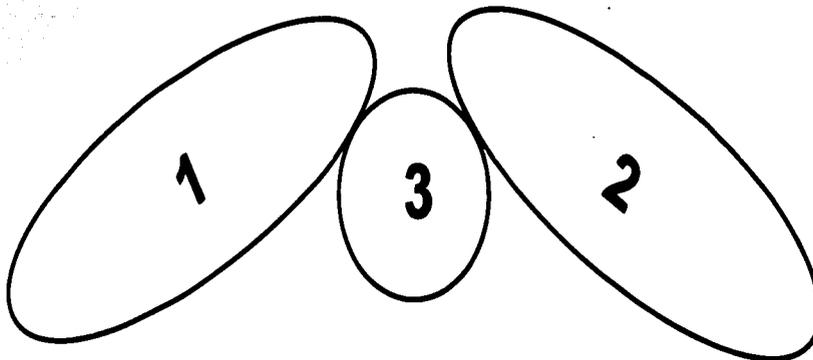


Figura 4.7: Configuración lineal considerada en el modelo algebraico para moléculas de tres cúmulos, con los centros de masa de los tres núcleos a lo largo del eje molecular z , con $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$ y $\theta_\lambda = 0^\circ$.

$$\begin{aligned}
 V(\rho, \lambda) = & (\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_T) \left(\frac{\rho^2}{2b^2} \right)^2 \\
 & + [4(\chi_\rho + \chi_{12\rho} + \chi_T)] - 7.938(\chi_{12\rho} + \chi_T) + \epsilon_\rho \left(\frac{\rho^2}{2b^2} \right) \\
 & + (\chi_\lambda + \chi_T) \left(\frac{\lambda^2}{2b^2} \right)^2 + [4(\chi_\lambda + \chi_T)] - 7.938\chi_T + \epsilon_\lambda \left(\frac{\lambda^2}{2b^2} \right) \\
 & + 2\chi_T \left(\frac{\lambda\rho}{2b^2} \right)^2 - 61.923(\chi_{12\rho} + \chi_{12} + \chi_T) + const \quad ,
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

donde en la constante aditiva se consideran aquellos términos que sólo dependen de la estructura de los núcleos individuales.

Ahora los parámetros del Hamiltoniano (4.5) pueden ajustarse pidiendo que el potencial mapeado presente también un mínimo para una configuración triangular similar a la de la figura 4.1 i.e. $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$ y $\theta_\lambda \neq 0^\circ$. En este caso los valores permitidos de los parámetros del Hamiltoniano (4.5) que aparecen en el potencial (4.19) se muestran en la figura 4.8.

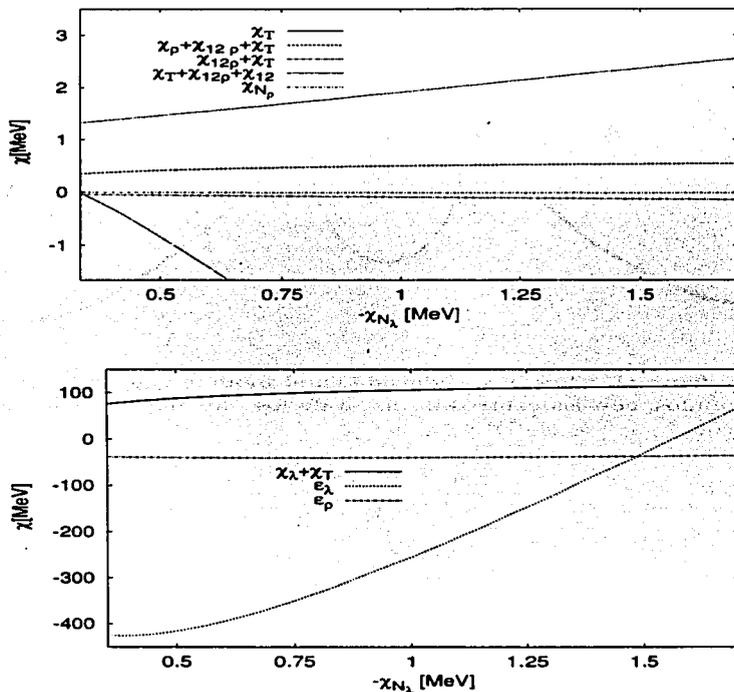


Figura 4.8: Valores permitidos, para el caso de la configuración lineal de la figura (4.7), de los parámetros del Hamiltoniano (4.5).

En la figura 4.8 nuevamente pueden observarse las diferentes combinaciones de los parámetros $\{\chi'_i\}$, que determinan la estructura específica del espectro de energía de la molécula nuclear, donde para las combinaciones $\chi_{12\rho} + \chi_T$, χ_{N_p} y $\chi_T + \chi_{12\rho} + \chi_{12}$ presentan un comportamiento prácticamente constante y que resulta en una estructura del espectro

de energía molecular fija para las excitaciones asociadas con estas combinaciones de los parámetros del Hamiltoniano del modelo.

Otros parámetros como ε_ρ y ε_λ , varían muy rápidamente conforme disminuye el valor de χ_{N_λ} . Sin embargo, estos parámetros afectan muy poco la estructura general de los espectros de energía de la molécula nuclear de tres cúmulos.

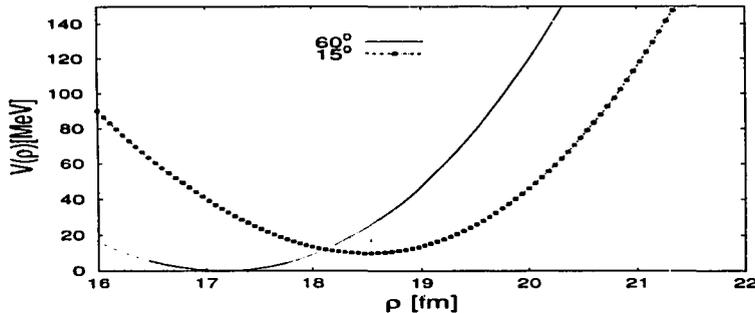


Figura 4.9: Potencial internuclear en la coordenada ρ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$ y $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$, que resulta de reproducir las características principales del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula ${}^{96}\text{Sr} + {}^{10}\text{Be} + {}^{146}\text{Ba}$ en una configuración de equilibrio de tipo lineal.

Por lo tanto, los espectros moleculares presentarán la misma estructura para las bandas vibracionales y rotacionales, para diferentes conjuntos de parámetros $\{\chi'_s\}$, aunque en diferentes escalas de energía.

Los potenciales que resultan de considerar las condiciones anteriores se muestran en la figura 4.9 para la coordenada ρ y en la figura 4.10 para la coordenada λ . En el primer caso se ha graficado $V(\rho, \lambda = \lambda_0)$ donde λ_0 es el valor de λ en el mínimo del potencial en la configuración lineal o triangular. En el caso de la figura 4.10 se ha graficado $V(\rho = \rho_0, \lambda)$ donde ρ_0 es el valor de ρ en el mínimo del potencial en la configuración lineal o triangular dependiendo de la orientación relativa de los núcleos pesados.

El espectro de energía obtenido, nuevamente no se encuentra determinado de manera única debido a las restricciones encontradas para los parámetros. Sin embargo, es posible calcular los espectros de energía que resultan para diferentes conjuntos de valores de parámetros $\{\chi'_s\}$, como se muestra en la figura 4.11 para los valores de los parámetros dados en la siguiente tabla:

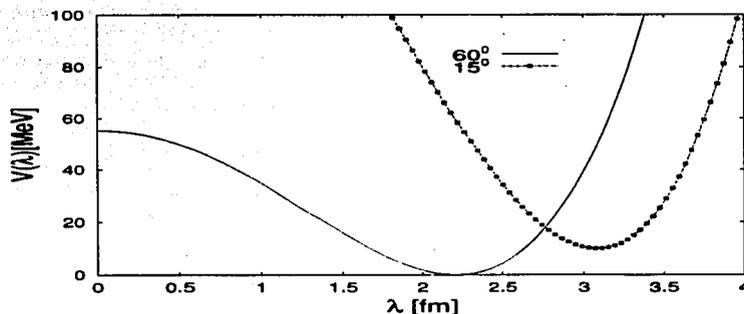


Figura 4.10: Potencial internuclear en la coordenada λ para dos orientaciones diferentes $\theta_{21} = -\theta_{22} = 60^\circ$ y $\theta_{21} \approx -\theta_{22} = 15^\circ$; que resulta de reproducir las características principales del potencial armónico de "doble-convolución" para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{140}\text{Ba}$ en una configuración de equilibrio de tipo lineal.

$$\begin{aligned}
 \chi_\rho &= 0.40745 \text{ MeV} \\
 \chi_T &= -0.146 \text{ MeV} \\
 \chi_{12\rho} &= 0.09793 \text{ MeV} \\
 \chi_\lambda &= 77.3299 \text{ MeV} \\
 \varepsilon_\rho &= -38.28326 \text{ MeV} \\
 \varepsilon_\lambda &= -425.5174 \text{ MeV} \\
 \chi_{N\rho} &= -0.00796 \text{ MeV} \\
 \chi_{N\lambda} &= -0.36 \text{ MeV} \\
 \chi_{12} &= 1.39432 \text{ MeV} \\
 n_{\rho_0} &= 51 \\
 n_{\lambda_0} &= 1 \\
 a &= 0.00234 \text{ MeV} \\
 c &= 0 \text{ MeV} \\
 b &= 1.70 \text{ fm}.
 \end{aligned}$$

(4.20)

El parámetro a se ha calculado del momento de inercia para esta molécula dado por [8]:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$a = \frac{\hbar^2}{2(\mu_{12}\rho_0^2 + \mu_{(12)3}\lambda_0^2)}$$

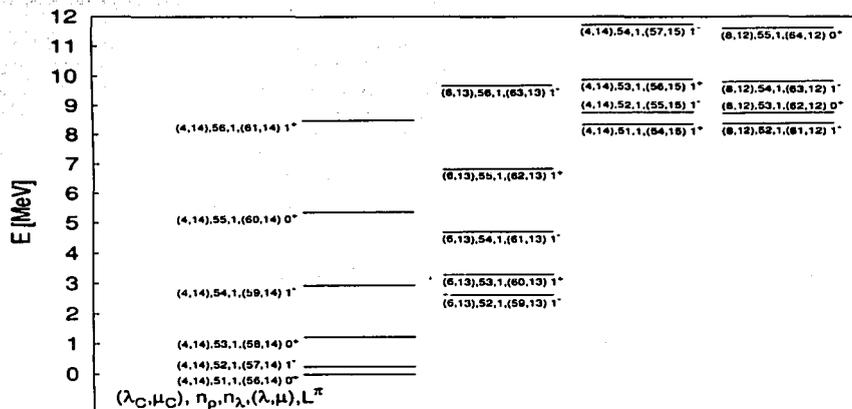


Figura 4.11: Espectro de energía para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ obtenido al reproducir el potencial armónico de "doble-convolución" para esta molécula, considerando el caso de una configuración de equilibrio de tipo lineal. Nuevamente, en esta figura únicamente se muestran las cabezas de las bandas vibracionales, las bandas rotacionales se encuentran en una escala de energías mucho menor.

En la figura 4.11 se han indicado las irreps de los diferentes acoplamientos considerados en el modelo. Aquí (λ_C, μ_C) corresponde al acoplamiento de la estructura internas de los núcleos entre sí; n_ρ y n_λ corresponde al número de vibraciones en los movimientos relativos, (λ, μ) representan las irreps totales, que resultan de considerar los diferentes acoplamientos para la molécula trinuclear, y L^π representan el momento angular y la paridad del estado de menor energía de cada banda vibracional.

En el espectro de energía de la figura 4.11 se observa la posibilidad de obtener espectros, para moléculas trinucleares, con características un poco diferentes a las obtenidas en el espectro de la figura 4.6, para la molécula trinuclear en una configuración de equilibrio triangular, porque, en el caso lineal la separación entre las bandas vibracionales

es un poco menor que en el caso triangular.

También, al comparar el espectro de la figura 4.11 con el caso de la hipotética molécula nuclear $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ del capítulo anterior (figura 3.14), puede observarse que los espectros obtenidos para los sistemas $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$, en el caso lineal, y $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$, son muy parecidos en la estructura de las bandas vibracionales, pero en una escala de energías diferente.

Al comparar estos resultados con los obtenidos en el caso de moléculas nucleares de dos cúmulos, se observa que en el caso de tres cúmulos **la separación en energía para los estados rotacionales, en una misma banda vibracional, resulta ser mucho menor que en el caso de dos cúmulos**. Lo anterior se debe a que estas moléculas de tres cúmulos son geoméricamente más extendidas que las moléculas de dos cúmulos.

También de estos resultados se obtiene que las transiciones cuadrupolares en moléculas nucleares de tres cúmulos se presentarán principalmente entre los estados rotacionales de una misma banda vibracional, ya que estos estados rotacionales corresponden a una sola irrep del grupo $SU(3)$ total. Por otra parte, las transiciones cuadrupolares entre estados moleculares de diferentes bandas vibracionales se presentarán con una probabilidad muy pequeña, porque estas bandas vibracionales corresponden a diferentes irreps del grupo $SU(3)$ total.

Capítulo 5

CONCLUSIONES.

A continuación se presentan los resultados obtenidos en esta investigación, así como las conclusiones que se pueden obtener de los mismos.

Antes recordemos que los principales objetivos de este trabajo de investigación, fueron:

- Obtener características generales de los espectros de energía de moléculas nucleares de tres núcleos.
- Proponer un posible Hamiltoniano algebraico para moléculas nucleares con estructura interna.
- Establecer la conexión del Hamiltoniano con el potencial internuclear.
- Aplicar el modelo para moléculas nucleares de dos núcleos, a moléculas nucleares conocidas ($^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$) para comparar los resultados con los existentes en la literatura.
- Reproducir los potenciales internucleares de las moléculas, calculados por el método de "doble-convolución", partiendo del potencial mapeado del Hamiltoniano algebraico.

Siguiendo el procedimiento inverso:

- Obtener los parámetros del Hamiltoniano algebraico del modelo (o restricciones para los mismos), partiendo de los potenciales internucleares. Esto es importante para moléculas nucleares hipotéticas, donde aún no hay información del espectro.
- Obtener los espectros de energía de las moléculas nucleares $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ con los parámetros del Hamiltoniano obtenidos de los potenciales internucleares.

Los resultados de este trabajo de investigación se pueden resumir de la siguiente manera:

Para investigar estas propiedades de las moléculas nucleares, se propuso un posible Hamiltoniano algebraico para la descripción de las excitaciones moleculares en sistemas de dos y tres núcleos, considerando en el Hamiltoniano del modelo la estructura interna de los núcleos utilizando el modelo algebraico de bosones interactuantes (IBM) [14, 15, 16], en su versión apropiada para cada núcleo.

En este modelo se consideró que las interacciones cuadrupolares entre los constituyentes de las moléculas resultan ser las más importantes para el caso de sistemas moleculares formados por núcleos bien deformados.

Como primer paso en la aplicación del modelo, se consideró el sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, para el que se ajustaron todos los parámetros del Hamiltoniano reproduciendo de manera satisfactoria las resonancias moleculares reportadas en la literatura [24, 41]. Con los valores obtenidos para los parámetros del Hamiltoniano comparamos el potencial molecular mapeado del Hamiltoniano del modelo con el potencial molecular de este sistema, calculado por el método de "doble-convolución", resultando que ambos potenciales presentan características similares en las cercanías del mínimo de energía para dos orientaciones diferentes de los ejes de simetría de los núcleos de carbón.

De estos resultados se puede concluir que; es posible reproducir el comportamiento de los potenciales moleculares en las cercanías del mínimo de energía, partiendo de reproducir las resonancias moleculares de un sistema.

El resultado anterior fue muy importante para este trabajo de investigación, porque condujo a considerar el proceso inverso donde, partiendo de reproducir el potencial molecular de un sistema, se pudiera determinar la estructura de los espectros moleculares del mismo.

Para reproducir estos potenciales moleculares se consideró la técnica de estados coherentes [56, 57, 64] que permitió obtener los potenciales mapeados del Hamiltoniano algebraico.

Con los potenciales mapeados del Hamiltoniano, se reprodujeron los potenciales moleculares calculados por el método de "doble-convolución", reproduciendo algunas de las características más generales en las cercanías del mínimo de los potenciales internucleares para los sistemas moleculares que se consideraron en este trabajo. Con este procedimiento se pudieron determinar los parámetros del Hamiltoniano y posteriormente se obtuvieron los espectros moleculares de moléculas nucleares.

Cuando se reprodujeron algunas de las características más generales de los potenciales moleculares calculados por el método de "doble-convolución", se trató de determinar de manera única todos los parámetros del Hamiltoniano del modelo, que están relacionados directamente con las excitaciones moleculares.

Sin embargo, siguiendo el procedimiento anterior, no fue posible determinar todos los parámetros de este modelo, porque al reproducir los potenciales moleculares e

intentar determinar de manera única estos parámetros, se encontraron algunas inconsistencias entre los potenciales mapeados y los potenciales de "doble-convolución" cuando se consideraron diferentes orientaciones relativas de los ejes de simetría de los núcleos en las moléculas.

Una posible explicación para estas inconsistencias es que los parámetros del modelo no se hayan podido determinar de manera única, debido a que los operadores que consideramos pueden conducir a que el mapeo del Hamiltoniano del modelo, presenta una estructura muy rígida, que sólo permite reproducir un número reducido de propiedades de los potenciales.

Para superar estas inconsistencias se determinaron los parámetros relacionados con las excitaciones moleculares partiendo de dar valores continuos a uno de los parámetros del Hamiltoniano. Siguiendo este procedimiento se encontraron restricciones para los valores permitidos de estos parámetros, con los que se obtuvieron espectros característicos para moléculas nucleares de dos y tres cúmulos.

De los resultados anteriores se puede concluir que, cuando se considera un modelo algebraico para moléculas nucleares, es necesario que el potencial asociado al Hamiltoniano del modelo no sólo presente un mínimo en función de las distancias en las mismas posiciones internucleares que el potencial molecular, sino que también será necesario que el potencial mapeado reproduzca otras características de los potenciales moleculares, sin llegar a contradicciones entre los potenciales del modelo y los potenciales moleculares obtenidos por el método de "doble-convolución". Para lo anterior, puede ser necesario considerar Hamiltonianos más generales que los considerados en el actual trabajo de investigación.

Con los parámetros del Hamiltoniano, determinados de las restricciones encontradas al reproducir los potenciales moleculares, se pudieron obtener varios espectros característicos para los diferentes sistemas moleculares que se consideraron en este trabajo i.e: la molécula nuclear $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$ y las posibles moléculas nucleares $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ y $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$.

En los espectros de energía obtenidos para estos sistemas se pueden observar diferentes características en su estructura de bandas vibracionales y rotacionales, y que dependen principalmente de la extensión geométrica de las moléculas.

Por ejemplo, para el caso de la molécula $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, (ver tabla 3.3 y la figura 3.5) el espectro de energía presenta una mezcla muy grande entre las bandas vibracionales y rotacionales. Dentro del modelo, esta mezcla se debe principalmente a una separación internuclear "pequeña" en la posición de equilibrio en el potencial molecular, junto con una masa reducida del sistema también "pequeña", que resultan en un momento de inercia muy chico, con el que las bandas rotacionales de esta molécula fácilmente se mezclan con las bandas vibracionales en el modelo.

Es importante también notar que el espectro que resulta para esta molécula reproduce satisfactoriamente las propiedades generales del espectro molecular reportado en

la literatura para este sistema [24, 41].

De los resultados anteriores se concluye que es posible obtener algunas características generales de los espectros moleculares al reproducir varias propiedades de los potenciales moleculares, en donde se obtuvieron algunas restricciones para los valores permitidos de los parámetros del Hamiltoniano.

Este resultado es muy importante, porque sugiere la posibilidad de obtener los espectros moleculares (o al menos características generales de los mismos) a partir de reproducir los potenciales moleculares de moléculas para las que aún no existe información experimental de sus espectros.

Siguiendo este procedimiento para obtener los parámetros del Hamiltoniano reproduciendo primero los potenciales moleculares, se obtuvieron espectros característicos para las posibles moléculas nucleares $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ y $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$ donde los potenciales moleculares de "doble-convolución" presentan un mínimo de energía para separaciones internucleares distintas de cero.

Para el caso de las moléculas nucleares $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ y $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$, se encontró que los espectros de energía de las moléculas de núcleos pesados presentan una muy bien definida separación entre las estructuras de las bandas vibracionales y las bandas rotacionales, porque para sistemas moleculares con núcleos pesados los momentos de inercia son muy grandes, resultando en un "empaquetamiento" de los estados rotacionales alrededor de la cabeza de las bandas vibracionales de la molécula. Esto difiere considerablemente respecto al caso del sistema $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$.

Para estas moléculas también se observaron otras diferencias en la estructura de sus espectros de energía. Principalmente en la estructura de bandas vibracionales; debido a que en el sistema $^{96}\text{Sr}+^{146}\text{Ba}$ la banda vibracional base y las primeras bandas vibracionales excitadas corresponden a diferentes números de excitación en el movimiento relativo, acoplados con una sola representación irreducible de las estructuras internas de los núcleos. Otras bandas vibracionales que resultan de otros acoplamientos de la estructura interna de los núcleos se encuentran a energías mucho mayores respecto a la banda vibracional base.

Mientras que para el sistema $^{96}\text{Sr}+^{10}\text{Be}+^{146}\text{Ba}$ en una configuración de equilibrio lineal, las bandas vibracionales presentan separaciones menores para las bandas asociadas con los diferentes acoplamientos entre los movimientos relativos de los centros de masa de los núcleos y todos los posibles acoplamientos de las estructuras internas de los núcleos.

Por otra parte, a diferencia de los últimos dos casos, para la configuración de equilibrio triangular para la molécula trinuclear se encontró que todas las posibles bandas vibracionales presentan separaciones energéticas muy grandes entre ellas, del orden de 1 MeV o mayores.

De los resultados anteriores dentro del modelo para moléculas nucleares con estructura interna podemos concluir dos hechos principales:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

El primero es que la estructura de las bandas rotacionales de las moléculas en este modelo está definida principalmente por la extensión física de la molécula en la posición de equilibrio del potencial molecular.

El segundo es que la estructura general de los espectros de energía para moléculas nucleares de tres cúmulos, sugiere que las transiciones cuadrupolares que pueden presentarse en estos sistemas estarán dominadas por las transiciones entre los estados rotacionales de una misma banda vibracional. Esto debido a que estos estados rotacionales corresponden a una sola irrep del grupo $SU(3)$ total. Por otra parte, las transiciones cuadrupolares entre estados moleculares de diferentes bandas vibracionales se presentarán con una probabilidad muy pequeña, porque estas bandas vibracionales corresponden a diferentes irreps del grupo $SU(3)$ total.

También, es importante señalar que la estructura de las bandas rotacionales, en los espectros de energía para moléculas trinucleares, resulta ser muy diferente a la estructura del espectro obtenido en el modelo algebraico sin estructura interna para estas moléculas [13]. Esto porque, en este espectro sólo es posible observar una estructura rotacional para la banda base de energía y para mayores energías la presencia de una interacción de tipo Coriolis en el Hamiltoniano, impide que todas las demás bandas excitadas muestren una estructura de bandas rotacionales, de manera contraria a los resultados de los modelos geométricos, donde se observa una clara separación en la energía de las bandas vibracionales y las rotacionales, de manera similar a los resultados de nuestro modelo.

Trabajos futuros en modelos algebraicos para moléculas nucleares de dos y tres cúmulos deberán considerar Hamiltonianos más generales que los considerados en este trabajo. Esperando que estos Hamiltonianos permitan reproducir más características de los potenciales moleculares, para así determinar de manera única todos los parámetros del Hamiltoniano obteniendo un sólo espectro permitido para moléculas nucleares.

Adicionalmente se podría considerar información extra, como puede ser el caso de las transiciones electromagnéticas para moléculas nucleares, que si bien aún no se han medido experimentalmente, ya se han realizado experimentos en esta dirección [73], que posiblemente permitirán obtener mayor información de los parámetros del Hamiltoniano de modelos algebraicos.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

Apéndice A

POTENCIALES MOLECULARES.

A.1. Potenciales moleculares calculados por el método de "doble-convolución"

En esta sección se revisan, muy brevemente, algunos de los aspectos más generales relacionados con los cálculos de los potenciales moleculares mediante el método de "doble-convolución". Estos potenciales se consideraron para la determinación de algunas condiciones que deben satisfacer los parámetros del modelo algebraico para moléculas nucleares de dos y tres núcleos.

El potencial molecular en general puede expresarse como la suma de los potenciales internucleares por pares $V_{ij}(\vec{\mathbf{R}}_{ij})$. Es decir, el potencial total $V(\mathbf{R}_{12}, \mathbf{R}_{13}, \dots, \mathbf{R}_{(N-1)N})$ de la molécula puede expresarse de la siguiente manera:

$$V(\mathbf{R}) = \sum_{i < j} V_{ij}(\vec{\mathbf{R}}_{ij}) \quad , \quad (\text{A.1})$$

donde $\vec{\mathbf{R}}_{ij}$ corresponde al vector que une los centros de masa de los núcleos i y j e indican los diferentes núcleos que conforman la molécula nuclear ($i, j=1, 2$ para moléculas de dos núcleos ó $i, j=1, 2, 3$ para moléculas de tres núcleos).

Debido a que el potencial que describe la interacción entre cada uno de los pares de núcleos debe depender no sólo de la distancia relativa entre los núcleos $\vec{\mathbf{R}}_{ij}$ sino también de las orientaciones relativas de los núcleos, es posible considerar un potencial de "doble-convolución" dado por la expresión:

$$V(\mathbf{R}_{ij}) = \iint d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \rho(\mathbf{r}_1) \rho(\mathbf{r}_2) v(\mathbf{s}) \quad , \quad (\text{A.2})$$

donde $\mathbf{s} = \mathbf{R}_{ij} + \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$.

Para el potencial nuclear se consideran interacciones efectivas del tipo M3Y [6, 49], para las densidades nucleares de cada uno de los fragmentos de la molécula nuclear se

considera una densidad dada por la distribución de Fermi:

$$\rho(\mathbf{r}) = \frac{\rho_0}{\left[1 + \exp \left\{ \frac{1}{a} \left(r - R_0 \left[1 + \sum_{\lambda=2,3,4} \beta_\lambda Y_{\lambda 0}(\theta, 0) \right] \right) \right\} \right]} \quad (\text{A.3})$$

La constante ρ_0 se fija de manera que las densidades de protones y neutrones correspondan al número de protones Z y N respectivamente. El radio R_0 y el parámetro de difusibilidad a se toman de los cálculos del modelo de gota.

El potencial molecular que se obtiene del método de "doble-convolución" para cualquiera dos núcleos de la molécula con una orientación en el espacio dada por los ángulos de Euler Ω_1 y Ω_2 , se obtiene realizando una expansión multipolar y estará dado por [74]:

$$V(\mathbf{R}, \Omega_1, \Omega_2) = \sum_{\lambda_i, \mu_i} V_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}^{\mu_1, \mu_2, \mu_3}(R) D_{\mu_1, 0}^{\lambda_1}(\Omega_1) D_{\mu_2, 0}^{\lambda_2}(\Omega_2) Y_{\lambda_3 \mu_3}(\hat{\mathbf{R}}) \quad (\text{A.4})$$

donde $D_{\mu_1, 0}^{\lambda_1}(\Omega_1)$ y $D_{\mu_2, 0}^{\lambda_2}(\Omega_2)$ corresponden a las matrices de Wigner para rotaciones en tres dimensiones, que permiten describir la orientación relativa de los dos núcleos. Por otra parte, $Y_{\lambda_3 \mu_3}(\hat{\mathbf{R}})$ describe la orientación del eje que une los dos núcleos respecto al sistema de referencia del laboratorio.

Para el caso en que ambos fragmentos se encuentren alineados a lo largo del mismo eje de simetría, formando una molécula nuclear de dos cúmulos en una configuración lineal [$\hat{\mathbf{R}} = (0, 0)$, $\Omega_1 = \Omega_2 = (0, 0, 0)$] se obtiene finalmente la siguiente expresión para el potencial molecular:

$$V(\mathbf{R}) = V(R) = \sum_{\lambda_i} V_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}^{0, 0, 0}(R) \quad (\text{A.5})$$

donde el término $V_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}^{\mu_1, \mu_2, \mu_3}(R)$ del desarrollo multipolar estará dado por:

$$V_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3}^{\mu_1, \mu_2, \mu_3}(R) = \frac{2}{\pi} \left(\langle \lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2 | \lambda_3 \mu_3 \rangle \right)^2 \int F_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(R)(r_1, r_2; R) \rho_{\lambda_1}(r_1) \rho_{\lambda_2}(r_2) dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 \quad (\text{A.6})$$

donde:

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_{\lambda=0,2,3,4} \rho_\lambda(r) Y_{\lambda 0}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\text{A.7})$$

$\langle \lambda_1 \mu_1 \lambda_2 \mu_2 | \lambda_3 \mu_3 \rangle$ es el coeficiente de Clebsch-Gordan y $F_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(r_1, r_2; R)$ corresponde al kernel del potencial de "doble-convolución" y esta dado por:

$$F_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3}(R) = \int q^2 dq j_{\lambda_1}(qr) j_{\lambda_2}(qr) j_{\lambda_3}(qR) \bar{v}(q) \quad (\text{A.8})$$

El término $\bar{v}(q)$ corresponde a la transformada de Fourier del término de interacción entre pares de núcleos, j_λ son las funciones de Bessel esféricas.

Para el potencial nucleón-nucleón $v(r)$ que aparece en el potencial de "doble-convolución" (A.2) se considerarán únicamente las componentes isoescalar v_{00} e isovectorial v_{01} de un potencial con una interacción de tipo M3Y dado por la siguiente expresión:

$$v(\mathbf{r}_{12}) = v_{00}(s) + \widehat{J}_{00}\delta(s) + (v_{01}(s) + \widehat{J}_{01}\delta(s)) \tau_1 \cdot \tau_2 + \frac{e^2}{s} \quad (\text{A.9})$$

donde [6]

$$\begin{aligned} v_{00}(r) &= \left[7999 \frac{e^{-4r}}{4r} - 2134 \frac{e^{-2.5r}}{2.5r} \right] \text{ MeV} \\ v_{01}(r) &= \left[-48855 \frac{e^{-4r}}{4r} + 1175.5 \frac{e^{-2.5r}}{2.5r} \right] \text{ MeV} \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

La magnitud del potencial isoescalar de pseudo-intercambio de rango cero \widehat{J}_{00} se toma de acuerdo a lo comúnmente establecido $\widehat{J}_{00} = -276 \text{ MeV fm}^3$ mientras que para el isovector de rango uno se toma $\widehat{J}_{01} = 217 \text{ MeV fm}^3$ [6].

Sin embargo, debido a que en el potencial de interacción (A.2) aparece una dependencia explícita en la densidad nuclear, el potencial molecular (A.4) presenta como una característica general una fuerte atracción de algunos cientos de MeV , para el caso del traslape total de las densidades, que no corresponde de ninguna manera a una situación física real.

Debido a la dificultad anterior, en la región donde las densidades nucleares de ambos núcleos presentan un traslape considerable se introduce adicionalmente un potencial repulsivo $V_{rep}(\mathbf{R})$, que se origina por los efectos de compresión y traslape de las densidades nucleares [6].

Para el caso de las moléculas nucleares de dos cúmulos consideradas en el capítulo 3, los potenciales moleculares para los sistemas $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$ fueron calculados siguiendo el procedimiento anterior.

Por otra parte, para los potenciales moleculares considerados para la molécula $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ (ec. 4.14), en general los potenciales que pueden calcularse directamente del método de "doble-convolución" corresponden a los potenciales $V(\mathbf{R}_{ij}, \Omega_i, \Omega_j)$, con $i, j = 1, 2, 3$, pero expresar estos potenciales en términos de las coordenadas de Jacobi $(\vec{\rho}, \vec{\lambda})$ (ec. 4.2), resulta muy complicado.

Para resolver estas dificultades se propone una expansión armónica para estos potenciales, conservando sólo términos hasta orden cuadrático en las separaciones relativas $(\delta\vec{\rho} = \vec{\rho} - \vec{\rho}_0, \delta\vec{\lambda} = \vec{\lambda} - \vec{\lambda}_0)$, obteniendo la siguiente expresión [8]:

$$V_{total} = \sum_{i < j} V_{ij}(\vec{\mathbf{R}}_{ij}) \approx \frac{1}{2} \sum_{i < j} C_{ij} (\vec{\mathbf{r}}_i - \vec{\mathbf{r}}_j)^2 = \frac{1}{2} C_{\rho} (\vec{\rho} - \vec{\rho}_0)^2 + \frac{1}{2} C_{\lambda} (\vec{\lambda} - \vec{\lambda}_0)^2 \quad (\text{A.11})$$

donde se han utilizado las definiciones de las coordenadas de Jacobi (4.2) y que corresponde al tipo de potencial molecular que se ha considerado en el capítulo 4 para moléculas nucleares de tres cúmulos donde:

$$\begin{aligned} C_\rho &= \frac{C_{23}m_1^2 + C_{13}m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \\ C_\lambda &= C_{13} + C_{23} \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

para el caso de moléculas nucleares de tres cúmulos en configuraciones de equilibrio de tipo lineal y:

$$\begin{aligned} C_\rho &= C_{12} + \frac{C_{23}m_1^2 + C_{13}m_2^2}{(m_1 + m_2)^2} \\ C_\lambda &= C_{13} + C_{23} \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

para el caso triangular.

Los coeficientes $C_{ij} = \frac{\partial^2 V(R_{ij}, \Omega_1, \Omega_2)}{\partial^2 R_{ij}} \Big|_{R_{ij}=R_{ij0}, \Omega_1=\Omega_{10}, \Omega_2=\Omega_{20}}$ corresponden al valor de la segunda derivada del potencial $V(R_{ij}, \Omega_1, \Omega_2)$ en la posición del mínimo ($R_{ij} = R_{ij0}, \Omega_i = \Omega_{i0}, \Omega_j = \Omega_{j0}$), que resulta de la expansión del potencial general (A.1), conservando sólo términos de orden cuadrático.

Para el caso de las moléculas nucleares de dos cúmulos $^{12}\text{C} + ^{12}\text{C}$ y $^{96}\text{Sr} + ^{146}\text{Ba}$ consideradas en el capítulo 3, y de la molécula nuclear $^{96}\text{Sr} + ^{10}\text{Be} + ^{146}\text{Ba}$ considerada en capítulo 4, los potenciales moleculares que se obtienen por el método de "doble-convolución" fueron calculados por Ş Mişicu como parte de la colaboración que él mantiene con el grupo de trabajo del Dr. Hess.

Apéndice B

GRUPO DE SIMETRÍA

$$G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4).$$

B.1. Posibles cadenas dinámicas del grupo de simetría $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$

En esta sección se presentan las posibles cadenas dinámicas asociadas con el grupo de simetría $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$, que se consideró en el capítulo 2 al construir el modelo para moléculas nucleares de dos cúmulos con estructura interna.

Antes de considerar estas cadenas dinámicas del grupo $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$ recordemos rápidamente la conexión entre los operadores de este grupo de simetría y su contenido geométrico, dado por los valores de expectación de estos operadores respecto a los estados coherentes (3.42,3.58), con los que posteriormente se obtienen los potenciales moleculares.

Si consideramos los operadores de Casimir asociados con el movimiento relativo, utilizando la técnica de los estados coherentes [56, 57, 64], puede obtenerse el contenido geométrico de estos operadores calculando su valor de expectación respecto al estado coherente (3.42):

$$|N, \delta_1 \rangle = \frac{(s^\dagger + \delta_1 \cdot p^\dagger)^N}{\sqrt{N!(1 + \delta_1^2)^N}} |0 \rangle, \quad (\text{B.1})$$

y si se considera el mapeo geométrico de los operadores de Casimir utilizados para describir las estructuras internas de cada uno de los núcleos, se utiliza el siguiente estado coherente (3.58):

$$|N_{2i}; \beta_i, \theta_{2i} \rangle = \frac{(s^\dagger + \alpha_{2i} \cdot \hat{\mathbf{d}}_i^\dagger)^{N_{2i}}}{\sqrt{N_{2i}!(1 + \alpha_{2i}^2)^{N_{2i}}}} |0 \rangle,$$

con α_{2i} dado por la ecuación (3.63):

$$\begin{aligned}\alpha_{20i} &= \frac{1}{2}\beta_i(3\cos^2\theta_{2i} - 1) \\ \alpha_{2\pm 1i} &= \pm\sqrt{\frac{3}{8}}\beta_i\sin(2\theta_{2i}) \\ \alpha_{2\pm 2i} &= \sqrt{\frac{3}{8}}\beta_i\sin^2(\theta_{2i}) \quad ,\end{aligned}$$

Los operadores de Casimir de interés en el estudio del mapeo geométrico de los Hamiltonianos asociados con las cadenas dinámicas del grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$, se muestran en la tabla B.1.

Los valores de expectación de estos operadores respecto al estado coherente total, que resulta del producto directo de los estados coherentes del movimiento relativo y el estado coherente de cada uno de los núcleos, se muestran en la tabla B.2, donde los signos (+) y (-) en el mapeo geométrico de los operadores de Casimir de los grupos $SU_{C_1,2}(3)$ y $SU_T(3)$, corresponden al caso de núcleos prolatos (+) y al caso de núcleos oblatos (-).

El parámetro δ_1 está relacionado con la distancia relativa r mediante por la ecuación (3.46):

$$\begin{aligned}\frac{r}{\sqrt{2N}b} &= \frac{\delta_1}{\sqrt{(1 + \delta_1^2)}}, \\ b &= \sqrt{\frac{\hbar}{\mu\omega_r}}.\end{aligned}\tag{B.2}$$

Ahora se presenta una lista con las posibles cadenas dinámicas pertenecientes al grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$, también se muestran las expresiones de los Hamiltonianos de cada una de estas cadenas dinámicas, en términos de los operadores listados en la tabla B.1, y finalmente para cada caso se describen las propiedades físicas más importantes de los potenciales moleculares, de cada cadena dinámica, calculados como el valor de expectación de cada Hamiltoniano respecto al estado coherente total.

Utilizando una notación simplificada para las siguientes cadenas dinámicas se han omitido el grupo más grande de cada cadena i.e: el grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$ así como el grupo final $SO(2)$ que también se ha omitido, para simplificar un poco la notación y que esta no sea demasiado repetitiva.

| Grupo | Operador de Casimir |
|------------------|---|
| $U_{C_1}(6)$ | $C_2(U_{C_1}(6)) = \tilde{N}_{2i}(\tilde{N}_{2i} + 5)$ |
| $U_{C_{12}}(6)$ | $C_2(U_{C_{12}}(6)) = C_2(U_{C_1}(6)) + C_2(U_{C_2}(6)) + 2 \sum_{i,j=1}^6 C_{i1}^j C_{j2}^i$ |
| $SO_{C_1}(6)$ | $C_2(SO_{C_1}(6)) = \tilde{N}_{2i}(\tilde{N}_{2i} + 4) - (s_i^\dagger s_i^\dagger - \tilde{a}_i^\dagger \cdot \tilde{a}_i^\dagger) (s_i s_i - \tilde{a}_i \cdot \tilde{a}_i)$ |
| $SO_{C_{12}}(6)$ | $C_2(SO_{C_{12}}(6)) = C_2(SO_{C_1}(6)) + C_2(SO_{C_2}(6)) + \sum_{i,j=1}^6 (C_{i1}^j) (C_{j2}^i - C_{i2}^j) + \sum_{i,j=1}^6 (C_{i2}^j) (C_{j1}^i - C_{i1}^j)$ |
| $U_{C_1}(5)$ | $C_2(U_{C_1}(5)) = \tilde{n}_{dt}(\tilde{n}_{dt} + 4)$ |
| $U_{C_{12}}(5)$ | $C_2(U_{C_{12}}(5)) = C_2(U_{C_1}(5)) + C_2(U_{C_2}(5)) + 2 \sum_{i,j=1}^5 C_{i1}^j C_{j2}^i$ |
| $SO_{C_1}(5)$ | $C_2(SO_{C_1}(5)) = \tilde{n}_{dt}(\tilde{n}_{dt} + 3) - (\tilde{a}_i^\dagger \cdot \tilde{a}_i^\dagger) (\tilde{a}_i \cdot \tilde{a}_i)$ |
| $SO_{C_{12}}(5)$ | $C_2(SO_{C_{12}}(5)) = C_2(SO_{C_1}(5)) + C_2(SO_{C_2}(5)) + \sum_{i,j=1}^5 (C_{i1}^j) (C_{j2}^i - C_{i2}^j) + \sum_{i,j=1}^5 (C_{i2}^j) (C_{j1}^i - C_{i1}^j)$ |
| $SU_{C_1}(3)$ | $C_2(SU_{C_1}(3)) = 2 (\hat{Q}_i^2 + \frac{3}{8} \hat{L}_i^2)$ |
| $SU_{C_{12}}(3)$ | $C_2(SU_{C_{12}}(3)) = 2 \left((\hat{Q}_1 + \hat{Q}_2)^2 + \frac{3}{8} (\hat{L}_1 + \hat{L}_2)^2 \right)$ |
| $SU_R(3)$ | $C_2(SU_R(3)) = \frac{3}{2} (\hat{Q}_R^2 + \frac{1}{2} \hat{L}_R^2)$ |
| $SU_T(3)$ | $C_2(SU_T(3)) = 2 \left((\hat{Q}_1 + \hat{Q}_2 + \sqrt{\frac{3}{4}} \hat{Q}_R)^2 + \frac{3}{8} (\hat{L}_1 + \hat{L}_2 + \hat{L}_R)^2 \right)$ |
| $SO_{C_1}(3)$ | $C_2(SO_{C_1}(3)) = \hat{L}_i^2$ |
| $SO_{C_{12}}(3)$ | $C_2(SO_{C_{12}}(3)) = (\hat{L}_1 + \hat{L}_2)^2$ |
| $SO_{C_R}(3)$ | $C_2(SO_{C_R}(3)) = \hat{L}_R^2$ |
| $SO_{C_T}(3)$ | $C_2(SO_{C_T}(3)) = (\hat{L}_1 + \hat{L}_2 + \hat{L}_R)^2$ |
| $SO_{C_R}(4)$ | $C_2(SO_{C_R}(4)) = \tilde{N}_R(\tilde{N}_R + 2) - (s_R^\dagger s_R^\dagger - \tilde{p}_R^\dagger \cdot \tilde{p}_R^\dagger) (s_R s_R - \tilde{p}_R \cdot \tilde{p}_R)$ |

 Tabla B.1: Operadores de Casimir pertenecientes a los diferentes subgrupos del grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$.

1

$$U_C(6) \otimes U_R(3) \supset SU_C(3) \otimes SU_R(3) \supset SU(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica, los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $U_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo corresponde un acoplamiento a nivel del grupo $SU(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

| Grupo | Valor de expectación |
|------------------|---|
| $U_{C_1}(6)$ | $\langle C_2(U_{C_1}(6)) \rangle = N_{2i}(N_{2i} + 5)$ |
| $U_{C_{12}}(6)$ | $\langle C_2(U_{C_{12}}(6)) \rangle = \frac{\langle C_2(U_{C_1}(6)) \rangle + \langle C_2(U_{C_2}(6)) \rangle + \frac{2N_{21}N_{22}}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)} [1 + \frac{1}{2}\beta_1\beta_2(3\cos(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1)]^2}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)}$ |
| $SO_{C_1}(6)$ | $\langle C_2(SO_{C_1}(6)) \rangle = N_{2i}(N_{2i} + 4) - N_{2i}(N_{2i} - 1) \frac{(1-\beta_1^2)^2}{(1+\beta_1^2)^2}$ |
| $SO_{C_{12}}(6)$ | $\langle C_2(SO_{C_{12}}(6)) \rangle = \langle C_2(SO_{C_1}(6)) \rangle + \langle C_2(SO_{C_2}(6)) \rangle$ |
| $U_{C_1}(5)$ | $\langle C_2(U_{C_1}(5)) \rangle = \frac{5N_{21}\beta_1^2}{(1+\beta_1^2)} + \frac{N_{21}(N_{21}-1)\beta_1^4}{(1+\beta_1^2)^2}$ |
| $U_{C_{12}}(5)$ | $\langle C_2(U_{C_{12}}(5)) \rangle = \frac{\langle C_2(U_{C_1}(5)) \rangle + \langle C_2(U_{C_2}(5)) \rangle + \frac{2N_{21}N_{22}}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)} [\frac{1}{2}\beta_1\beta_2(3\cos(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1)]^2}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)}$ |
| $SO_{C_1}(5)$ | $\langle C_2(SO_{C_1}(5)) \rangle = \frac{4N_{21}\beta_1^2}{(1+\beta_1^2)}$ |
| $SO_{C_{12}}(5)$ | $\langle C_2(SO_{C_{12}}(5)) \rangle = \langle C_1(SO_{C_1}(5)) \rangle + \langle C_2(SO_{C_2}(5)) \rangle$ |
| $SU_{C_1}(3)$ | $\langle C_2(SU_{C_1}(3)) \rangle = 10N_{2i} + \frac{4N_{21}(N_{21}-1)\beta_1^2}{(1+\beta_1^2)^2} [2 + \sqrt{2}\beta_1 + \frac{1}{4}\beta_1^2]$ |
| $SU_{C_{12}}(3)$ | $\langle C_2(SU_{C_{12}}(3)) \rangle = \frac{\langle C_2(SU_{C_1}(3)) \rangle + \langle C_2(SU_{C_2}(3)) \rangle + \frac{8N_{21}N_{22}\beta_1\beta_2}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)} [1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1)}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)}$ |
| $SU_R(3)$ | $\langle C_2(SU_R(3)) \rangle = \frac{4N\delta^2}{(1+\delta^2)} + \frac{N(N-1)\delta^4}{(1+\delta^2)^2}$ |
| $SU_T(3)$ | $\langle C_2(SU_T(3)) \rangle = \langle C_2(SU_{C_1}(3)) \rangle + \langle C_2(SU_{C_2}(3)) \rangle + \langle C_2(SU_R(3)) \rangle + \frac{\sqrt{8} \frac{N\delta^2}{(1+\delta^2)} \frac{N_{21}\beta_1}{1+\beta_1^2} [1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{21}) - 1) + \sqrt{8} \frac{N\delta^2}{(1+\delta^2)} \frac{N_{22}\beta_2}{1+\beta_2^2} [1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{22}) - 1) + 8 \frac{N_{21}N_{22}\beta_1\beta_2}{(1+\beta_1^2)(1+\beta_2^2)} [1 \pm \frac{\beta_1}{2\sqrt{2}}][1 \pm \frac{\beta_2}{2\sqrt{2}}](3\cos^2(\theta_{21} - \theta_{22}) - 1)}{(1+\delta^2)^2}$ |
| $SO_{C_1}(3)$ | $\langle C_2(SO_{C_1}(3)) \rangle = \frac{6N_{21}\beta_1^2}{1+\beta_1^2}$ |
| $SO_{C_{12}}(3)$ | $\langle C_2(SO_{C_{12}}(3)) \rangle = \langle C_2(SO_{C_1}(3)) \rangle + \langle C_2(SO_{C_2}(3)) \rangle$ |
| $SO_{C_R}(3)$ | $\langle C_2(SO_R(3)) \rangle = \frac{2N\delta^2}{(1+\delta^2)}$ |
| $SO_{C_T}(3)$ | $\langle C_2(SO_T(3)) \rangle = \langle C_2(SO_{C_1}(3)) \rangle + \langle C_2(SO_{C_2}(3)) \rangle + \langle C_2(SO_R(3)) \rangle$ |
| $SO_{C_R}(4)$ | $\langle C_2(SO_R(4)) \rangle = N(N+2) - N(N-1) \left(\frac{1-\delta^2}{1+\delta^2} \right)^2$ |

Tabla B.2: Valores de expectación para los operadores de Casimir asociados con los diferentes subgrupos del grupo de simetría $U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$.

$$H = \chi_{C_{12}} C_2(U_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}} C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_R C_2(SU_R(3)) + \chi_T C_2(SU_T(3)) + aL_T^2 + bK^2 \quad (B.3)$$

En esta notación acoplamiento "fuertes", se refiere a un acoplamiento a nivel de grupos mayores a $U(3)$, o en este grupo, para los grados de libertad de los núcleos de la

molécula dinuclear, así como para el movimiento relativo, y acoplamiento "débiles" se refiere a un acoplamiento a nivel de los grupos menores a $U(3)$.

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total puede presentar un mínimo para distancias internucleares diferentes de cero, para combinaciones especiales de los parámetros χ_T y χ_R . Adicionalmente la posición de mínimo en el potencial puede variar en función de la orientación relativa de los ejes de simetría de los núcleos, así como la diferencia de energías para diferentes orientaciones.

2

$$SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes SU_R(3) \supset SU_C(3) \otimes SU_R(3) \supset SU(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SU_C(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta en un acoplamiento a nivel del grupo $SU(3)$. Esta cadena dinámica corresponde al caso que se consideró en el modelo para moléculas nucleares de 2 cúmulos con estructura interna en el capítulo 2. El Hamiltoniano asociado esta cadena dinámica es:

$$H = \chi_{C_1} C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_{C_2} C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_{C_{12}} C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_R C_2(SU_R(3)) + \chi_T C_2(SU_T(3)) + aL_T^2 + bK^2. \quad (B.4)$$

Como vio en el capítulo 2 este Hamiltoniano puede generalizarse para ajustar de manera adecuada los potenciales moleculares utilizando un Hamiltoniano como el considerado en la ecuación (3.53).

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total puede presentar un mínimo para distancias internucleares diferentes de cero, para combinaciones especiales de los parámetros χ_T y χ_R . Adicionalmente la posición de mínimo en el potencial puede variar en función de la orientación relativa de los ejes de simetría de los núcleos, así como la diferencia de energías en la posición del mínimo para diferentes orientaciones.

3

$$U_C(6) \otimes U_R(3) \supset \{U_C(5) \supset SO_C(5)\} \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $U_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano de esta cadena dinámica resulta ser:

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

$$H = \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(U_{C_{12}}(5)) + \chi_{C_{12}}^3 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_{C_{12}}^4 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.5)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

4

$$U_C(6) \otimes U_R(3) \supset SU_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SU_C(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(6)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.6)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

5

$$U_C(6) \otimes U_R(3) \supset \{SO_C(6) \supset SO_C(5)\} \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SO_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SO_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^3 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_{C_{12}}^4 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.7)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar, cambiando la orientación relativa de los núcleos.

6

$$U_{C_1}(5) \otimes U_{C_2}(5) \otimes U_R(3) \supset \{U_C(5) \supset SO_C(5)\} \otimes SU_R(3) \\ \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $U_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1} C_2(U_{C_1}(5)) + \chi_{C_2} C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(5)) + \\ \chi_{C_{12}}^2 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \\ \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \quad (B.8)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

7

$$U_{C_1}(5) \otimes U_{C_2}(5) \otimes U_R(3) \supset SO_{C_1}(5) \otimes SO_{C_2}(5) \otimes U_R(3) \supset \\ \supset SO_C(5) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SO_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(U_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^1 C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \\ \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \\ \chi_R^2 L_R^2 + \chi_{C_{12}}^2 L_{C_{12}}^2 + aL_T^2. \quad (B.9)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

8

$$SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes U_R(3) \\ \supset SU_C(3) \otimes SU_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SU_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura

interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1} C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_{C_2} C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_R^2 L_R^2 + \chi_{C_{12}}^2 L_{C_{12}}^2 + aL_T^2 \quad (\text{B.10})$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

9

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_{C_1}(6) \otimes \mathbf{O}_{C_2}(6) \otimes \mathbf{U}_R(3) &\supset \{\mathbf{O}_C(6) \supset \mathbf{O}_C(5)\} \otimes \mathbf{SU}_R(3) \\ &\supset \mathbf{SO}_C(3) \otimes \mathbf{SO}_R(3) \supset \mathbf{SO}(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SO_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1} C_2(SO_{C_1}(6)) + \chi_{C_2} C_2(SO_{C_2}(6)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(SO_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_R^2 L_R^2 + \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + aL_T^2 \quad (\text{B.11})$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

10

$$\begin{aligned} \mathbf{SO}_{C_1}(6) \otimes \mathbf{SO}_{C_2}(6) \otimes \mathbf{U}_R(3) &\supset \mathbf{SO}_{C_1}(5) \otimes \mathbf{SO}_{C_2}(5) \otimes \mathbf{U}_R(3) \supset \mathbf{SO}_C(5) \otimes \mathbf{U}_R(3) \\ &\supset \mathbf{SO}_C(3) \otimes \mathbf{SO}_R(3) \supset \mathbf{SO}(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SO_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(SO_{C_1}(6)) + \chi_{C_2}^1 C_2(SO_{C_2}(6)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_R^2 L_R^2 + \chi_{C_{12}}^2 L_{C_{12}}^2 + aL_T^2 \quad (\text{B.12})$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

11

$$\begin{aligned} U_{C_1}(5) \otimes U_{C_2}(5) \otimes U_R(3) \supset SO_{C_1}(5) \otimes SO_{C_2}(5) \otimes SO_R(3) \\ \supset SO_{C_1}(3) \otimes SO_{C_2}(3) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados débilmente a nivel del grupo $SO(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned} H = \chi_{C_1}^1 C_2(U_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^1 C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \\ \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_{C_1}^3 L_{C_1}^2 + \\ \chi_{C_2}^3 L_{C_2}^2 + \chi_{C_{12}} L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \end{aligned} \quad (B.13)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

12

$$\begin{aligned} SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes U_R(3) \\ \supset SO_{C_1}(3) \otimes SO_{C_2}(3) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados débilmente a nivel del grupo $SU(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned} H = \chi_{C_1}^1 C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_{C_2}^1 C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \\ \chi_{C_1}^2 L_{C_1}^2 + \chi_{C_2}^2 L_{C_2}^2 + \chi_{C_{12}} L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \end{aligned} \quad (B.14)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

13

$$\begin{aligned} SO_{C_1}(6) \otimes SO_{C_2}(6) \otimes U_R(3) \supset SO_{C_1}(5) \otimes SO_{C_2}(5) \otimes SO_R(3) \\ \supset SO_{C_1}(3) \otimes SO_{C_2}(3) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados débilmente a nivel del grupo $SO(3)$ y el acoplamiento entre la estructura

interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(SO_{C_1}(6)) + \chi_{C_2}^1 C_2(SO_{C_2}(6)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_R^1 C_2(SU_R(3)) + \chi_{C_1}^3 L_{C_1}^2 + \chi_{C_2}^3 L_{C_2}^2 + \chi_{C_1}^4 L_{C_1}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.15)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

14

$$U_C(6) \otimes U_R(4) \supset SO_C(6) \otimes U_R(4) \supset U(4) \supset SO(4) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $U_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $U(4)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(U_{C_1}(6)) + \chi_{C_2}^2 C_2(U_{C_2}(4)) + \chi_R C_2(U_R(4)) + \chi_T C_2(SO(4)) + aL^2 \quad (B.16)$$

15

$$U_C(6) \otimes SO_R(4) \supset \{U_C(5) \supset SO_C(5)\} \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $U_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(U_{C_1}(6)) + \chi_{C_2}^2 C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_1}^3 C_2(SO_{C_1}(5)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_1}^4 L_{C_1}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.17)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares iguales a cero, independientemente de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

16

$$U_C(6) \otimes O_R(4) \supset SU_C(3) \otimes O_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SU_C(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.18)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, sólo puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas a cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

17

$$U_C(6) \otimes O_R(4) \supset \{O_C(6) \supset O_C(5)\} \otimes O_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SO_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SO_{C_{12}}(6)) + \chi_{C_{12}}^3 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_{12}}^4 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.19)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas a cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

18

$$U_{C_1}(5) \otimes U_{C_2}(5) \otimes SO_R(4) \supset \{U_C(5) \supset SO_C(5)\} \otimes SO_R(4) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $U_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura

interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1} C_2(U_{C_1}(5)) + \chi_{C_2} C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(U_{C_{12}}(5)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.20)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas a cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

19

$$U_{C_1}(5) \otimes U_{C_2}(5) \otimes SO_R(4) \supset SO_{C_1}(5) \otimes SO_{C_2}(5) \otimes SO_R(4) \supset SO_C(5) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SO_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(U_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^1 C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2(SO_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_{12}}^2 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.21)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas a cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

20

$$SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes SO_R(4) \supset SU_C(3) \otimes SO_R(4) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3).$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $SU_C(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$H = \chi_{C_1}^1 C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_{C_2}^1 C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_{12}}^2 C_2(SU_{C_{12}}(3)) + \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2 \quad (B.22)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas de cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$, y el valor de los potenciales en este mínimo puede variar variando la orientación relativa de los núcleos.

21

$$\begin{aligned} \text{SO}_{C_1}(6) \otimes \text{SO}_{C_2}(6) \otimes \text{SO}_R(4) &\supset \{\text{SO}_C(6) \supset \text{SO}_C(5)\} \otimes \text{SO}_R(4) \\ &\supset \text{SO}_C(3) \otimes \text{SO}_R(3) \supset \text{SO}(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $\text{SO}_C(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $\text{SO}(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned} H = & \chi_{C_1} C_2 (\text{SO}_{C_1}(6)) + \chi_{C_2} C_2 (\text{SO}_{C_2}(6)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2 (\text{SO}_{C_{12}}(6)) + \\ & \chi_{C_{12}}^2 C_2 (\text{SO}_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2 (\text{SO}_R(4)) + \\ & \chi_{C_{12}}^3 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas de cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

22

$$\begin{aligned} \text{SO}_{C_1}(6) \otimes \text{SO}_{C_2}(6) \otimes \text{SO}_R(4) &\supset \text{SO}_{C_1}(5) \otimes \text{SO}_{C_2}(5) \otimes \text{SO}_R(4) \\ &\supset \text{SO}_C(5) \otimes \text{SO}_R(4) \supset \text{SO}_C(3) \otimes \text{SO}_R(3) \supset \text{SO}(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados fuertemente a nivel del grupo $\text{SO}_C(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $\text{SO}(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned} H = & \chi_{C_1} C_2 (\text{SO}_{C_1}(6)) + \chi_{C_2} C_2 (\text{SO}_{C_2}(6)) + \chi_{C_1}^2 C_2 (\text{SO}_{C_1}(5)) + \\ & \chi_{C_2}^2 C_2 (\text{SO}_{C_2}(5)) + \chi_{C_{12}}^1 C_2 (\text{SO}_{C_{12}}(5)) + \chi_R^1 C_2 (\text{SO}_R(4)) + \\ & \chi_{C_{12}}^2 L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas de cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

23

$$\begin{aligned} U_{C_1}(5) \otimes U_{C_2}(5) \otimes SO_R(4) &\supset SO_{C_1}(5) \otimes SO_{C_2}(5) \otimes SO_R(3) \\ &\supset SO_{C_1}(3) \otimes SO_{C_2}(3) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados débilmente a nivel del grupo $SO_C(3)$ partiendo de la simetría dinámica $U(5)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned} H = & \chi_{C_1}^1 C_2(U_{C_1}(5)) + \chi_{C_2}^1 C_2(U_{C_2}(5)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \\ & \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_{C_1}^3 L_{C_1}^2 + \chi_{C_2}^3 L_{C_2}^2 + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \\ & \chi_{C_{12}} L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \end{aligned} \quad (B.25)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas de cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

24

$$\begin{aligned} SU_{C_1}(3) \otimes SU_{C_2}(3) \otimes SO_R(4) \\ \supset SO_{C_1}(3) \otimes SO_{C_2}(3) \otimes SO_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados débilmente a nivel del grupo $SO_C(3)$ partiendo de la simetría dinámica $SU(3)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned} H = & \chi_{C_1}^1 C_2(SU_{C_1}(3)) + \chi_{C_2}^1 C_2(SU_{C_2}(3)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \\ & \chi_{C_1}^2 L_{C_1}^2 + \chi_{C_2}^2 L_{C_2}^2 + \chi_{C_{12}} L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + aL_T^2. \end{aligned} \quad (B.26)$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas de cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

25

$$\begin{aligned} SO_{C_1}(6) \otimes SO_{C_2}(6) \otimes SO_R(4) &\supset SO_{C_1}(5) \otimes SO_{C_2}(5) \otimes SO_R(4) \\ &\supset O_{C_1}(3) \otimes O_{C_2}(3) \otimes O_R(3) \supset SO_C(3) \otimes SO_R(3) \supset SO(3). \end{aligned}$$

En esta cadena dinámica los grados de libertad internos de los dos núcleos están acoplados débilmente a nivel del grupo $SO_C(3)$ partiendo de la simetría dinámica $SO(6)$ y el acoplamiento entre la estructura interna y el movimiento relativo resulta a nivel

de los grupos de momento angular $SO(3)$. El Hamiltoniano asociado con esta cadena dinámica resulta ser:

$$\begin{aligned}
 H = & \chi_{C_1}^1 C_2(SO_{C_1}(6)) + \chi_{C_2}^1 C_2(SO_{C_2}(6)) + \chi_{C_1}^2 C_2(SO_{C_1}(5)) + \\
 & \chi_{C_2}^2 C_2(SO_{C_2}(5)) + \chi_R^1 C_2(SO_R(4)) + \chi_{C_1}^3 L_{C_1}^2 + \chi_{C_2}^3 L_{C_2}^2 + \\
 & \chi_{C_{12}} L_{C_{12}}^2 + \chi_R^2 L_R^2 + a L_T^2.
 \end{aligned}
 \tag{B.27}$$

El valor de expectación de este Hamiltoniano respecto al estado coherente total, puede presentar un mínimo para distancias internucleares distintas de cero, dependiendo de los valores de los parámetros $\chi_R^1 > 0$ y $\chi_R^2 > 0$.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

GRUPO DE SIMETRÍA $G = U_{C_1}(6) \otimes U_{C_2}(6) \otimes U_R(4)$.

Bibliografía

- [1] D. A. Bromley, J. A. Kuehner y E. Almqvist, *Phys. Rev. Lett.* **4** (1960) 365.
- [2] W. Greiner, J. Y. Park and W. Scheid, *Nuclear Molecules*, World Scientific, Singapore 1995.
- [3] A. V. Ramayya *et. al.*, *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998) 947.
- [4] J. H. Hamilton *et. al.*, in *Proceedings of the Symposium on Fundamental Issues in Elementary Matter*, Bad Honnef, Germany, 2000, edited by W. Greiner (P. Systems Bt. Debrecen 2001) 151.
- [5] P. O. Hess, *Rev. Mex. Fis.* **47(2)** (2001) 116.
- [6] P.O. Hess, W. Scheid, W. Greiner and J. Hamilton, *J. Phys. G* **25** (1999) L139, Ş. Mişicu, P.O. Hess, A. Sandelescu y W. Greiner, *ibid* **25** (1999) L147.
- [7] P.O. Hess, Ş. Mişicu, W. Greiner and W. Scheid, *J. Phys. G* **26** (2000) 1, P.O. Hess, Ş. Mişicu and W. Greiner, *Rev. Mex. Fis.* **46** (2000) 73.
- [8] Ş. Mişicu, P. O. Hess and W. Greiner, *Phys. Rev. C* **63** (2001) 054308.
- [9] R. Bijker, F. Iachello and A. Leviatan, *Ann. of Phys. (N.Y.)* **236** (1994) 69.
- [10] R. Bijker and A. Leviatan, *Few-Body Systems* **25** (1998) 89.
- [11] R. Bijker and F. Iachello, *Ann. Phys. (N.Y.)* **298** (2002) 334.
- [12] R. Bijker, P.O. Hess, S. Misicu, *Heavy Ion Physics* **13** (2001), 89-92.
- [13] P. O. Hess, R. Bijker, Ş. Mişicu, *Rev. Mex. Fis.* **47(Sup. 2)** (2001) 52.
- [14] F. Iachello and A. Arima, *The Interacting Boson Model* Cambridge University Press, Cambridge (1987).
- [15] A. Frank and P. van Isacker, *Algebraic Methods in Molecular and Nuclear Structure*, Wiley Intersciences, New York (1994).



- [16] D. Bonatsos, *The Interacting Boson Models of Nuclear Structure*, Oxford Science Publications, Oxford (1988).
- [17] G. Herzberg *Molecular Spectra an Molecular structure* Van Nostrand Reinhold, New York (1950).
- [18] B. Imanishi, *Phys. Lett.* **27 B** (1968) 267.
- [19] W. Greiner, in *Fundamental Problems in Heavy-Ion Collisions*, ed. by N. Cindro, W. Greiner and R. Caplar, World Scientific Pu. (1984) 529.
- [20] P. O. Hess and W. Greiner, *Il Nuovo Cimento* **83** (1984) 76.
- [21] P. O. Hess, W. Greiner and W. T. Pinkston, *Phys. Rev. Lett.* **53** (1984) 1535.
- [22] A. Sandulescu, D. Poenaru and W. Greiner, *Sov. J. Part. Nucl.* **11** (1980) 518.
- [23] H. J. Rose and G. A. Jones, *Nature.* **307** (1984) 245.
- [24] U. Abbondanno, *Report INFBN/BE-91/11*, Trieste 1991.
- [25] W. Scheid, W. Greiner and R. Lemmer, *Phys. Rev. Lett.* **25** (1970) 176.
- [26] Y. Abe, *Prog. Theor. Phys.* **63** (1980) 722.
- [27] Y. Abe, Y. Kondo and T. Matsuse, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **68** (1980) 303.
- [28] Y. Abe, Y. Kondo and T. Matsuse, *Prog. Theor. Phys.* **59** (1978) 139.
- [29] Y. Abe, T. Matsuse and Y. Kondo, *Phys. Rev C.* **19** (1979) 1365.
- [30] T. Matsuse, Y. Kondo and Y. Abe, *Prog. Theor Phys.* **59** (1978) 1904.
- [31] Y. Kondo, D. A. Bromley and Y. Abe, *Phys. Rev C.* **22** (1980), 1068 and *Prog. Theor Phys.* **63** (1980) 722.
- [32] G. Helling, W. Scheid and W. Greiner, *Phys. Lett.* **36 B** (1971) 64.
- [33] H. J. Fink, W. Scheid and W. Greiner, *Nucl. Phys A.* **188** (1972) 259.
- [34] O. Castaños and A. Frank, *J. Phys, G; Nucl. Phys.* **7** (1981) 1483.
- [35] R. A. Chatwin, J. S. Eck, D. Robson and A. Richter, *Phys. Rev C.* **1** (1970) 795.
- [36] W. Greiner and W. Scheid, *J. Physique.* **32** (1971) C6 - 91.
- [37] D. Pocanic and N. Cindro, *J. Phys G.* **5** (1979) L25.

- [38] N. Cindro and D. Pocanic, *J. Phys G* **6** (1980) 359.
- [39] D. Pocanic and N. Cindro, *Nucl. Phys A* **433** (1985) 531.
- [40] F. Iachello, *Phys. Rev C* **23**, (1981) 2778.
- [41] K. A. Erb and D. A. Bromley, *Phys. Rev C* **23** (1981) 2781.
- [42] P. Holzer, U. Mosel and W. Greiner, *Nucl. Phys A* **138** (1969) 241.
- [43] D. Scharnweber, W. Greiner and U. Mosel, *Nucl. Phys A* **164** (1971) 257.
- [44] J. A. Maruhn and W. Greiner, *Z. Phys.* **251** (1972) 431.
- [45] J.Y. Park, W. Greiner and W. Scheid *Phys Rev.* **C21** (1980) 958.
- [46] S. E. Koonin, *Prog. Part. Nucl. Phys.* **4** (1980) 283.
- [47] A. V Ramayya *et. al.*, *Phys. Rev. C* **57** (1998) 2370.
- [48] W. von Oertzen, *Z. Phys. A* **354**, (1996) 37; **357** (1997) 365; *Nuovo Cim. A* **110** (1997) 895.
- [49] Ş Mişicu, A. Sandulescu, F. Carstoiu, M. Rizea and W. Greiner, *Il Nuovo Cimento* **A112** (1999) 313.
- [50] G. Bertsch, J. Borysowicz, H. Mcmanus, W. G. Love, *Nucl. Phys. A* **284** (1977) 399.
- [51] F. Carstoiu and R. J. Lombard, *ann. Phys.(N.Y)* **217** (1992) 279.
- [52] F. Iachello, *Chem. Phys. Lett.* **78** (1981) 581
- [53] F. Iachello, and R. D. Lavine, *J. Chem. Phys.* **77** (1982) 3046.
- [54] J.P. Elliot, *Proc R. Soc. London Ser. A* **245** (1958) 128, J.P. Elliot *Proc R. Soc. London Ser. A* **245** (1958) 562.
- [55] J. L. Dunham, *Phys. Rev.* **41** (1932) 721.
- [56] J. N. Ginocchio and M.W. Kirson, *Phys. Rev. Lett.* **44** (1980) 1744.
- [57] O. S. Roosmalen, PhD-Thesis, Univ. Groningen (Netherland) (1982).
- [58] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem*, (Springer Verlag Heidelberg 1980.
- [59] F. Iachello, *Nucl. Phys. A* **421** (1984) 97c.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN

- [60] H. J. Daley and F. Iachello, *Ann. Phys.* **167** (1986) 73.
- [61] J. P. Elliot and A. Evans, *Phys. Lett.* **B101** (1981) 216.
- [62] H. Naqvi and J. P. Draayer, *Nucl. Phys.* **A516** (1990) 351.
- [63] J. Cseh and G. Lévai, *Ann. Phys. (N.Y.)* **230** (1994) 165.
- [64] K. T. Hecht, *The Vector Coherent State Method and its Applications to Physical Problems of Higher Symmetries*, Lecture Notes in Physics 290 (Springer-Verlag, Heidelberg, 1987).
- [65] J. N. Ginocchio and M.W. Kirson, *Nucl. Phys.* **A350** (1980) 31.
- [66] S. Raman, C. H. Malarkey, W. T. Milner, C. W. Netsor and P. H. Stelson, *Atom. Data and Nucl. Data Tables* **36** (1987) 1.
- [67] J. M. Eisenberg and W. Greiner, *Nuclear Theory I: Nuclear Models* North-Holland, Amsterdam (1987).
- [68] Comunicación Privada con S. Mişicu
- [69] Comunicación Privada entre N. Cindro y P. O. Hess, (1999)
- [70] S. Levit and U. Smilansky *Nucl. Phys.* **A389** (1982) 56.
- [71] P. Möller, J. R. Nix, W. D. Myers and W. J. Swiatecki, *Atom. Data and Nucl. Data Tab* **59** (1995)
- [72] A. Leviatan and M. W. Kirson *Ann. Phys.* **188** (1988) 142.
- [73] F. Haas, *Proceeding of the Symposium on Nuclear Clusters: From Light Exotic to Superheavy Nuclei*, Rauschholzhausen, Germany, August 3 to 9 (2002).
- [74] A. Sandulescu, Ş. Mişicu, F. Carstoiu and W. Greiner *Phys. Part. Nucl.* **30** (1999) 386.

Publicaciones

- H. Yépez M, P. O. Hess and Ş. Mişicu, " Heavy Nuclear Molecules with 2 and 3 Clusters" APH N. S. *Heavy Ion Physics* **16** (2002) 16.
- H. Yépez M and P. O. Hess, " Nuclear Vibron Model with 2 and 3 Clusters for Heavy Nuclear Molecules" APH N. S. *Heavy Ion Physics* **18** (2003) 2.
- P.O.Hess, H. Yépez M, Ş. Mişicu, "The Geometrical Mapping of a Nuclear Vibron Model", *Revista Mexicana de Física* (Aceptado para su publicación).
- H. Yépez M, P. O. Hess, Ş. Mişicu, "A Nuclear Vibron Model Applied To Light and Heavy Nuclear Molecules" *Phys. Rev. C* **68** (2003) 014314.

TESIS CON
FALLA DE ORIGEN