



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
POSGRADO EN CIENCIAS FÍSICAS  
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

DESDOBLAMIENTO DE NIVELES EN POTENCIALES  
DE CÚMULOS NUCLEARES

TESIS  
QUE PARA OPTAR POR EL GRADO DE:  
MAESTRO EN CIENCIAS (FÍSICAS)

PRESENTA:  
ADRIAN HORACIO SANTANA VALDÉS

TUTOR PRINCIPAL  
DR. ROELOF BIJKER BIJKER  
INSTITUTO DE CIENCIAS NUCLEARES

MIEMBROS DEL COMITÉ TUTOR  
DR. EFRAÍN RAFAEL CHÁVEZ LOMELÍ  
INSTITUTO DE FÍSICA  
DR. LUIS ARMANDO ACOSTA SÁNCHEZ  
INSTITUTO DE FÍSICA

CIUDAD DE MÉXICO JULIO 2018



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

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

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



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>1</b>
<b>1. Introducción y Antecedentes</b>	<b>3</b>
<b>2. Marco Teórico.</b>	<b>7</b>
2.1. Modelo de Capas de Cúmulos . . . . .	7
2.1.1. Factor Geométrico . . . . .	8
2.1.2. Potencial de cúmulo . . . . .	10
2.2. Método de solución . . . . .	11
<b>3. Resultados</b>	<b>15</b>
3.1. Etiqueta de estados . . . . .	15
3.1.1. Grupos de simetría . . . . .	15
3.1.2. Etiqueta de estados intrínsecos . . . . .	18
3.2. Resultados numéricos . . . . .	22
3.2.1. Caso Dumbbell . . . . .	23
3.2.2. Caso Triángulo . . . . .	30
3.2.3. Caso tetraedro . . . . .	44
<b>4. Resumen y conclusiones</b>	<b>57</b>
<b>Bibliografía</b>	<b>63</b>



# Resumen

El descubrimiento reciente de nuevos estados excitados en  $^{12}\text{C}$  ha generado un gran interés en cúmulos nucleares tanto experimental como teórico. En analogía con el modelo Nilsson, se estudia el desdoblamiento de niveles de partícula independiente en potenciales de cúmulos nucleares donde la distancia relativa entre los cúmulos juega el papel de la deformación. En particular, se investiga el desdoblamiento de niveles de partícula independiente como función de la deformación para las configuraciones geométricas del dumbbell, del triángulo equilátero y del tetraedro. Los resultados obtenidos dan información valiosa sobre la multipolaridad de las interacciones más importantes.



# Capítulo 1

## Introducción y Antecedentes

El estudio del átomo ha sido desde alrededor de los comienzos del siglo XX un área de gran interés, por una razón muy simple pero muy importante: son los bloques básicos, como se conocía en aquella época, sobre los cuales están hechos los objetos macroscópicos con los que convivimos, incluidos nosotros los seres humanos. La estructura de los átomos ha sido analizada por disímiles modelos e investigados por muchos estudios experimentales siendo el trabajo de Rutherford la piedra angular para tanto los modelos como estudios experimentales posteriores. Del trabajo de Rutherford se extrae que el átomo se compone por una nube de electrones que orbitan alrededor de un núcleo que contiene toda la carga positiva y el 99.9 % de toda la masa del átomo. La estructura de la nube de electrones es vital en el estudio de moléculas y reacciones químicas que son regidas por la electrodinámica cuántica. Por otro lado el núcleo es el objeto central en los estudios de elementos radiactivos y en la formación de galaxias y el universo. El núcleo, a su vez, es un objeto compuesto a diferencia del electrón siendo sus componentes los protones y neutrones también denominados nucleones. La estructura del núcleo es rica y variada, desde los núcleos ligeros ( $A \lesssim 70 - 80$ ) donde predominan efectos de capas hasta los núcleos pesados ( $A \gtrsim 100$ ) donde es importante los efectos colectivos.

El núcleo muestra comportamientos diferentes [1], por un lado muestra propiedades de una gota líquida donde su tamaño y forma se corresponden a un balance entre las interacciones nucleón-nucleón y la interacción coulombiana. Esta gota líquida muestra propiedades de efectos colectivos tales como vibraciones donde los modos vibracionales distorsionan la superficie nuclear y para condiciones críticas esta gota se fisiona. Al aumentar la masa nuclear,  $A$ , aumenta el número de nucleones y por ende la cantidad de protones que aumenta la repulsión coulombiana. Cerca de  $A = 100$  la repulsión coulombiana debiera de causar que los núcleos se fisionen espontáneamente. Sin embargo gracias a los efectos de capa, que están asociado con las propiedades de partícula independiente en un potencial promedio, se encuentran un grupo de números mágicos para el número de nucleones en el núcleo donde aumenta drásticamente la estabilidad y se sobrepone a la repulsión de los protones. Para describir la estabilidad de los núcleos pasado del punto en el que se fisiona al asumir que el núcleo es una gota líquida, se necesita superponer los comportamientos

microscópicos debido a los efectos de capas con los macroscópicos de la gota líquida.

Además existen núcleos que expresan otras propiedades aparte de las ya mencionadas, en específico para núcleos ligeros donde el número de neutrones es igual al de protones,  $N = Z$ . Entre los ejemplos icónicos se encuentran  ${}^8\text{Be}$ ,  ${}^{12}\text{C}$  y  ${}^{16}\text{O}$ . Las correlaciones se convierten en una característica vital, siendo una de ellas el apareamiento de nucleones. Cuando las correlaciones son espaciales nos referimos a ellas como cúmulos [1]. El tipo de cúmulo más predominante es el de partícula alfa. Esto es debido a su alto valor de energía de enlace, gran diferencia energética entre el primer estado excitado y el estado base (20 MeV), y su gran inercia. La posibilidad de que los núcleos ligeros, como  ${}^8\text{Be}$ ,  ${}^{12}\text{C}$  y  ${}^{16}\text{O}$ , se describan como partículas alfa que se encuentran en cierta configuración geométrica ha sido pensado desde los inicios de estudiar el núcleo cuando se empleó la mecánica cuántica para describir el núcleo [2], donde la primera configuración geométrica pensada fue la lineal por Morigana [3]. Un ingrediente esencial se obtiene al estudiar con detalle la energía de enlace de los núcleos. Para núcleos ligeros con número de nucleones pares y el mismo número de protones que neutrones son particularmente estable como  ${}^{12}\text{C}$ ,  ${}^{16}\text{O}$ ,  ${}^{20}\text{Ne}$ ..., al mismo tiempo se observa una relación lineal que señala al aparente comportamiento constante de la interacción  $\alpha - \alpha$ . Otro ingrediente esencial para el arreglo de las partículas alfa en el núcleo son las simetrías. El origen de estas simetrías se relacionan con las propiedades cuánticas del sistema. Esto se puede evidenciar al analizar bajo una lupa los modelos de partícula independiente, donde los trabajos [4, 5, 6] han encontrado simetrías en el modelo del oscilador deformado (Modelo de Nilsson [7]) que expresan los números mágicos deformados como sumas de números mágicos esféricos, que sería una descripción de tipo cúmulo. Otro ejemplo es el trabajo [8, 9, 10] donde se estudia como emerge la imagen de cúmulos en los modelos de partícula independiente, o sea las simetrías asociadas con el arreglo de los cúmulos alfa se permea, por tanto incluso si no están presentes explícitamente dejan una huella evidente.

En los trabajos [11, 12, 13] se realiza una revisión extensa del balance de los efectos de partícula independiente y colectivos que se encuentran en los trabajos experimentales y los modelos, y cómo emergen la huella de los cúmulos y sus simetrías en los experimentos como a su vez en los diferentes modelos. Para nuestro trabajo en particular, es de gran interés el Modelo Algebraico de Cúmulos (o ACM por sus siglas en inglés), donde se aplicó primero para  ${}^{12}\text{C}$  y mas adelante para  ${}^{16}\text{O}$  [14, 15, 16]. En estos trabajos se asumieron para tanto el  ${}^{12}\text{C}$  y el  ${}^{16}\text{O}$  que están formados por  $k$  cúmulos alfa en los vértices de un triángulo y un tetraedro respectivamente donde la distancia de las partículas alfa al centro de masa de todo el sistema es de aproximadamente 2 fm. El ACM es un modelo de interacción de bosones que describe el movimiento relativo de  $k$  cúmulos basados en el álgebra  $U(\nu + 1)$ , donde  $\nu = 3(k - 1)$ . En este modelo es posible explorar de manera concreta situaciones complejas donde se presentan los cúmulos y encontrar para casos límites fórmulas cerradas que permiten comprender adecuadamente los resultados de tales cálculos. El ACM aunque no le fue prestado atención en sus inicios, tras haberse encontrado el estado  $5^-$  en  ${}^{12}\text{C}$

por [17], el ACM ha sido tomado más en cuenta. El espectro de niveles de energía es una huella de la simetría, por lo que el descubrimiento experimental de tal estado  $5^-$  es central para relacionar el  $^{12}\text{C}$  con una estructura geométrica de cúmulos alfa, como es descrito por [15]. En el modelo se sigue trabajando en mejorar sus predicciones, como se evidencia en [18].

El ACM actualmente se restringe a los casos de  $^8\text{B}$ ,  $^{12}\text{C}$  y  $^{16}\text{O}$  ( $k = 2, 3$  y  $4$  respectivamente) y para expandirlo a núcleos vecinos se necesita de información extra, principalmente conocer cuáles serían las interacciones principales al añadir un nucleón extra (dipolar, cuadrupolar, etc.). Para encontrar esta información podemos hacer uso de descripciones fenomenológicas donde se estudia estructuras compuesta por  $k$  partículas alfa y  $x$  nucleones. Un modelo tal es el Modelo de Capas de Cúmulos (CSM por sus siglas en inglés) [19], que es un tipo de modelo de capas pero en vez de tener un potencial promedio tenemos un potencial de cúmulos. El estudio de este modelo es muy semejante al tratamiento realizado en el marco del Modelo de Nilsson [7], donde se estudia el desdoblamiento de los niveles esféricos debido a un potencial de cúmulos y cómo se desarrolla el desdoblamiento al deformar el potencial, donde el parámetro de deformación para el CSM es la distancia relativa de los cúmulos al centro de masa del sistema,  $\beta$ . El trabajo de esta tesis será, a partir del trabajo [19], encontrar diferencias entre si al añadir un protón o un neutrón el desdoblamiento cambia, estudiar el traslape de los estados al aumentar la deformación, estudiar más a fondo la simetría presente y encontrar un método numérico que relacione las soluciones con las simetrías encontradas teóricamente y encontrar los multipolos de interacción principales en este sistema. Con esto último tendremos la base para poder expandir el ACM y formular el Modelo Algebraico Fermiónico de Cúmulos (ACFM por sus siglas en inglés).

En el capítulo 2 presentaremos el CSM propuesto en [19], donde mostraremos las diferentes propiedades que exhibe. Seguidamente en el capítulo 3, en la sección 3.1 estudiaremos la simetría del problema de primeros principios donde nos propondremos a encontrar la resolución de nuestro sistema en la simetría adecuada. Las soluciones numéricas y su comportamientos serán mostradas en la sección 3.2 y se relacionarán éstas soluciones con el resultado teórico de la sección 3.1, se mostrará la diferencia de añadir un protón o un neutrón y cuales multipolos del CSM se encuentran como principales para cada configuración geométrica de cúmulos. Finalmente en el capítulo 4 se hará un resumen de la discusión de los resultados y se hablará de cuales son los caminos futuros a seguir.



# Capítulo 2

## Marco Teórico.

### 2.1. Modelo de Capas de Cúmulos

Realicemos una revisión del Modelo de Capas de Cúmulos (CSM por sus siglas en inglés) [19]. En este modelo los núcleos con  $Z = N = 2k$  se asumen que están compuestos de  $k$  cúmulos de partícula alfa, cuyas distribuciones de masa y carga tienen forma gaussiana

$$\rho_\alpha(\vec{r}) = \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha r^2}. \quad (2.1)$$

La densidad de masa y carga del núcleo, compuesto por una estructura de  $k$  cúmulos, es

$$\begin{aligned} \rho(\vec{r}) &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_{i=1}^k \exp\left[-\alpha(\vec{r} - \vec{r}_i)^2\right] \\ &= \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\alpha(r^2 + \beta^2)} 4\pi \sum_{\lambda\mu} i_\lambda(2\alpha\beta r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i), \end{aligned} \quad (2.2)$$

donde  $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$ , haciendo uso de las coordenadas esféricas;  $\vec{r}_i = (\beta, \theta_i, \phi_i)$ , donde  $\beta$  es la distancia de los cúmulos al centro de masa del sistema;  $\theta_i$  y  $\phi_i$  son los ángulos correspondientes,  $i_\lambda = j_\lambda(ix)/i^\lambda$  son las funciones de Bessel esféricas modificadas. Se hizo uso de la expansión del exponente en funciones cilíndricas.

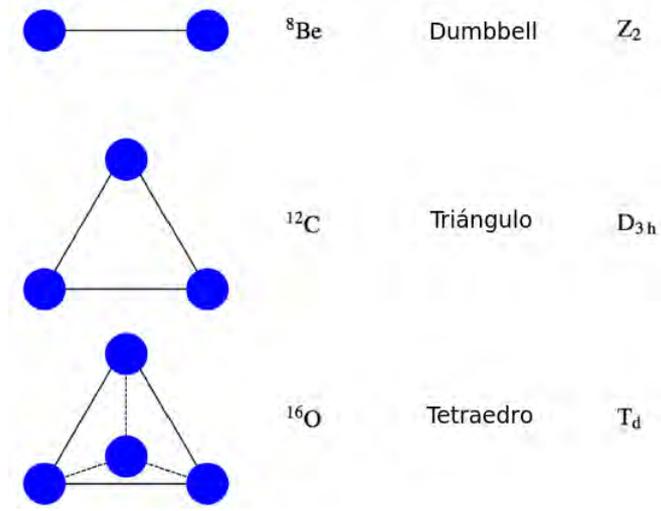
Un término importante es el factor geométrico,  $\sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i)$ , que contiene la información de la configuración geométrica de las partículas alfa.

La distribución se reduce a la de forma puntual en el límite

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} \rho(\vec{r}) = \sum_{i=1}^k \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \frac{1}{r^2} \delta(r - \beta) \sum_{\lambda\mu} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i). \quad (2.3)$$

La densidad de masa y carga se obtienen de multiplicar la ecuación (2.2) por  $Ze/k$  ó  $A/k$  respectivamente, donde  $Z$  es la carga total,  $A$  la masa total y  $k$  es el número de cúmulos.

Las configuraciones geométricas estudiadas en este trabajo están mostradas en la figura 2.1. Estas configuraciones se relacionan a grupos de simetría discretas, en específico  $Z_2$ (dumbbell),  $D_{3h}$ (triángulo) y  $T_d$  (tetraedro).



**Figura 2.1:** Configuraciones geométricas para  $k$  cúmulos, donde los valores posibles son 2,3 y 4.

### 2.1.1. Factor Geométrico

Como fue dicho anteriormente, el factor en la ecuación (2.2) que establece la simetría para cada configuración es  $\sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i)$ . Este factor permite que la construcción de la base se pueda realizar tal que aumente la rapidez del cálculo, que se explicará en la sección 2.2.

#### 2.1.1.1. Configuración de dos cuerpos

En el caso del dumbbell tenemos una simetría relacionada con el grupo  $Z_2$ . Los ángulos de las partículas alfas están dadas por  $(\theta_1, \phi_1) = (0, -)$  y  $(\theta_2, \phi_2) = (\pi, -)$  por tanto

$$\begin{aligned}
 \sum_{i=1}^2 Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) &= \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \left[ \delta_{\mu,0} + \sqrt{\frac{(\lambda+\mu)!}{(\lambda-\mu)!}} P_{\lambda}^{-\mu}(-1) \right] \\
 &= \delta_{\mu,0} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} [1 + P_{\lambda}(-1)] \\
 &= \delta_{\mu,0} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} [1 + (-1)^{\lambda}].
 \end{aligned} \tag{2.4}$$

Esta configuración tiene simetría axial. Debido al factor geométrico, la ecuación (2.4) tendrá valores diferentes de cero solo para  $\mu = 0$  y  $\lambda$  par. Esto nos permite que la construcción de la base se realice haciendo uso del número cuántico  $m$  y la paridad.

### 2.1.1.2. Configuración de tres cuerpos

Para el caso del triángulo el grupo de simetría relacionado es  $D_{3h}$ , los ángulos de los cúmulos son  $(\theta_1, \phi_1) = (0, -)$ ,  $(\theta_2, \phi_2) = (2\pi/3, 0)$  y  $(\theta_3, \phi_3) = (2\pi/3, \pi)$ , entonces

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 Y_{\lambda\mu}^* (\theta_i, \phi_i) &= \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \left[ \delta_{\mu,0} + \sqrt{\frac{(\lambda+\mu)!}{(\lambda-\mu)!}} P_{\lambda}^{-\mu} \left(-\frac{1}{2}\right) (1 + (-1)^{\mu}) \right] \\ &= \begin{cases} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \left[ 1 + 2P_{\lambda} \left(-\frac{1}{2}\right) \right] & \mu = 0 \\ \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\lambda+\mu)!}{(\lambda-\mu)!}} 2P_{\lambda}^{-\mu} \left(-\frac{1}{2}\right) & \mu = \pm 2\kappa \neq 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.5)$$

donde  $\kappa = 1, 2, \dots \in \mathbb{Z}$  y  $|\mu| \leq \lambda$ .

Los multipolos de la ecuación (2.2) que devuelven valores diferentes de cero son  $\lambda = 0, 2, 3, 4, \dots$ , y observamos que a diferencia de la configuración de dos cuerpos aquí no podemos hacer uso de ninguno de los números cuánticos para etiquetar los estados. Para ello necesitaremos las representaciones irreducibles de los grupos de simetría acordes a la configuración que será explicado en la sección 2.2.

### 2.1.1.3. Configuración de cuatro cuerpos

En el caso del tetraedro el grupo de simetría correspondiente es  $T_d$ . Los ángulos de los cúmulos son  $(\theta_1, \phi_1) = (0, -)$ ,  $(\theta_2, \phi_2) = (\gamma, 0)$ ,  $(\theta_3, \phi_3) = (\gamma, 2\pi/3)$  y  $(\theta_4, \phi_4) = (\gamma, 4\pi/3)$  con  $\cos \gamma = -1/3$ , por lo que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^4 Y_{\lambda\mu}^* (\theta_i, \phi_i) &= \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \left[ \delta_{\mu,0} + \sqrt{\frac{(\lambda+\mu)!}{(\lambda-\mu)!}} P_{\lambda}^{-\mu} \left(-\frac{1}{3}\right) \left(1 + 2 \cos \frac{2\mu\pi}{3}\right) \right] \\ &= \begin{cases} \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \left[ 1 + 3P_{\lambda} \left(-\frac{1}{3}\right) \right] & \mu = 0 \\ \sqrt{\frac{2\lambda+1}{4\pi}} \sqrt{\frac{(\lambda+\mu)!}{(\lambda-\mu)!}} 3P_{\lambda}^{-\mu} \left(-\frac{1}{3}\right) & \mu = \pm 3\kappa \neq 0, \end{cases} \end{aligned} \quad (2.6)$$

donde  $\kappa = 1, 2, \dots \in \mathbb{Z}$  y  $|\mu| \leq \lambda$ .

En esta configuración los multipolos que devuelven valores diferentes de cero son  $\lambda = 0, 3, 4, 6, \dots$ , y al igual que para el caso de tres cuerpos tenemos que hacer uso de las representaciones irreducibles de los grupos de simetría acordes a la configuración.

## 2.1.2. Potencial de cúmulo

En el CSM se considera la interacción de un nucleon con el potencial generado por la densidad de cúmulos, ecuación (2.2). Este potencial,  $V(\vec{r})$ , se obtiene convolucionando la densidad dada por la ecuación (2.2) con una interacción de partícula-cuerpo, en este caso nucleon-alfa,  $v(\vec{r} - \vec{r}')$ ,

$$V(\vec{r}) = \int \rho(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') d^3r'. \quad (2.7)$$

En el CSM se toma como  $v(\vec{r} - \vec{r}')$  a un potencial de Volkov [20]. En [19] se explica porque usar este potencial y sus beneficios. Como resultado de la convolución obtenemos (VdellaRocca) la forma general

$$V(\vec{r}) = -V_0 \sum_{\lambda\mu} f_\lambda(r) Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \quad (2.8)$$

donde

$$f_\lambda(r) = e^{-\alpha(r^2 + \beta^2)} 4\pi i_\lambda(2\alpha\beta r). \quad (2.9)$$

Además del potencial central, se encuentra la interacción espín-órbita

$$V_{so}(\vec{r}) = V_{0,so} \vec{s} \cdot (-\vec{\nabla} V(\vec{r}) \times \vec{p}). \quad (2.10)$$

Las componentes del gradiente en las direcciones angulares,  $\hat{\theta}$  y  $\hat{\phi}$ , aportan contribuciones mucho más pequeñas que la componente radial. Entonces nos quedamos solo con el término radial

$$V_{so}(\vec{r}) = V_{0,so} \frac{1}{r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} \vec{s} \cdot \vec{l}. \quad (2.11)$$

Debido a que  $V(\vec{r})$  no tiene simetría esférica, no conmuta con  $\vec{s} \cdot \vec{l}$  por lo que tenemos que tomar la forma simetrizada

$$V_{so}(\vec{r}) = V_{0,so} \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} (\vec{s} \cdot \vec{l}) + (\vec{s} \cdot \vec{l}) \frac{1}{r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} \right] \quad (2.12)$$

donde

$$\begin{aligned} \frac{1}{r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} &= \sum_{\lambda\mu} \left( -2\alpha f_\lambda(r) + \frac{\lambda}{r^2} f_\lambda(r) + \frac{2\alpha\beta}{r} f_{\lambda+1}(r) \right) \times \\ &\times Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \end{aligned} \quad (2.13)$$

y el factor  $-V_0$  en la ecuación (2.8) ha sido absorbido en  $V_{0,so}$ .

En el caso en que el nucleon sea un protón, se ha de incluir la interacción coulombiana,  $V_C(\vec{r})$ , la cual se obtiene convolucionando la densidad de carga,  $\frac{Ze^2}{k}\rho(\vec{r})$ , con la función de Green,  $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$ ,

$$V_C(\vec{r}) = \frac{Ze^2}{k} \int \rho(\vec{r}') \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} d\vec{r}' \quad (2.14)$$

usando la expansión de  $\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$  en su forma estándar

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|} = \sum_{p,q} \left[ \frac{r^p/r'^{p+1}}{r'^p/r^{p+1}} \right] \frac{4\pi}{2p+1} Y_{pq}^*(\theta', \phi') Y_{pq}(\theta, \phi) \quad (2.15)$$

donde los términos superiores (inferiores) entre corchetes aplican para  $r \leq r'$  ( $r \geq r'$ ). Por tanto

$$\begin{aligned} V_C(\vec{r}) &= \frac{Ze^2}{k} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \int \sum_{\lambda\mu} \sum_{p,q} \frac{4\pi}{2p+1} f_\lambda(r) \left[ \frac{r^p/r'^{p+1}}{r'^p/r^{p+1}} \right] \times \\ &\quad \times Y_{\lambda\mu}(\theta', \phi') Y_{pq}^*(\theta', \phi') Y_{pq}(\theta, \phi) \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) d\vec{r}' \\ &= \frac{Ze^2}{k} \left(\frac{\alpha}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \sum_{\lambda\mu} \frac{4\pi}{2\lambda+1} Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \times \\ &\quad \times \left[ \frac{1}{r^{\lambda+1}} \int_0^r f_\lambda(r) r'^\lambda r'^2 dr' + r^\lambda \int_r^\infty f_\lambda(r) \frac{1}{r'^{\lambda+1}} r'^2 dr' \right]. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Los niveles de energía de partícula independiente y los estados intrínsecos dependientes de  $\beta$  para cada configuración ( $k = 2, 3, 4$ ) de la figura 2.1 se encuentran resolviendo la ecuación de Schrödinger

$$H = \frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) + V_{so}(\vec{r}) + V_C(\vec{r}) \quad (2.17)$$

donde en el caso de los neutrones  $V_C(\vec{r}) = 0$ .

## 2.2. Método de solución

Para resolver el problema de autovalores y autovectores de  $H$  en la ecuación (2.17) usamos como base las autofunciones del oscilador armónico

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = \sqrt{\frac{2 \binom{n-l}{2}! (2\nu)^{l+3/2}}{\Gamma\left(\frac{n+l+3}{2}\right)}} r^l e^{-\nu r^2} L_{\frac{n-l}{2}}^{l+\frac{1}{2}}(2\nu r^2) Y_{lm}(\theta, \phi) \quad (2.18)$$

donde  $\nu$  es la anchura del oscilador armónico

$$\begin{aligned}\nu^2 &= \left(\frac{m\omega}{2\hbar}\right)^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 \frac{mc^2}{2\hbar^2 c^2} \\ \therefore \nu^2 &= V_0\alpha \frac{mc^2}{2\hbar^2 c^2}.\end{aligned}\quad (2.19)$$

Los elementos de matriz de  $V(\vec{r})$ ,  $V_{so}(\vec{r})$  y  $V_C(\vec{r})$  en esta base son

$$\begin{aligned}\langle n, 1/2, l, j, m | V(\vec{r}) | n', 1/2, l', j', m' \rangle &= -V_0 \sum_{\lambda\mu} \langle n, l | f_\lambda(r) | n', l' \rangle \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \times \\ &\times \langle 1/2, l, j, m | Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) | 1/2, l', j', m' \rangle\end{aligned}\quad (2.20)$$

$$\begin{aligned}\langle n, 1/2, l, j, m | V_{so}(\vec{r}) | n', 1/2, l', j', m' \rangle &= V_{0,so} \frac{1}{4} \left[ j'(j'+1) - l'(l'+1) + j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{2} \right] \times \\ &\times \left\langle n, 1/2, l, j, m \left| \frac{1}{r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} \right| n', 1/2, l', j', m' \right\rangle\end{aligned}\quad (2.21)$$

donde

$$\begin{aligned}\left\langle n, 1/2, l, j, m \left| \frac{1}{r} \frac{\partial V(\vec{r})}{\partial r} \right| n', 1/2, l', j', m' \right\rangle &= \sum_{\lambda\mu} \langle n, l | Q_\lambda(r) | n', l' \rangle \times \sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \\ &\times \langle 1/2, l, j, m | Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) | 1/2, l', j', m' \rangle \\ \Rightarrow Q_\lambda(r) &= \left( -2\alpha f_\lambda(r) + \frac{\lambda}{r^2} f_\lambda(r) + \frac{2\alpha\beta}{r} f_{\lambda+1}(r) \right)\end{aligned}\quad (2.22)$$

y los elementos de matriz de  $Y_{\lambda\mu}$  tienen la forma

$$\begin{aligned}\langle 1/2, l, j, m | Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) | 1/2, l', j', m' \rangle &= (-)^\mu \sqrt{\frac{(2\lambda+1)(2j+1)}{4\pi(2j'+1)}} \frac{1}{2} \left( 1 + (-1)^{l+l'+\lambda} \right) \times \\ &\times \langle j, -m; \lambda, \mu | j', -m' \rangle \langle j, -1/2; \lambda, 0 | j', -1/2 \rangle.\end{aligned}\quad (2.23)$$

Al crear el programa de cómputo para calcular los niveles de partícula independiente,  $\epsilon_\Omega$ , la construcción de la base fue realizada ordenando los estados a partir del número cuántico  $m$ , seguido de  $j$ ,  $l$  y finalmente  $n$ . Haciendo uso de las condiciones impuesta por las ecuaciones (2.4) a (2.6) para los multipolos que devuelven valores diferentes de cero, podemos encontrar condiciones para los elementos de matriz de  $H$ .

**Tabla 2.1:** Resumen de condiciones para los multipolos y elementos de matrices debido a  $\sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i)$ . También se muestran los bloques matriciales.

Condición del factor geométrico	Restricciones sobre los elementos de matriz	Bloques
Dumbbell $\mu = 0, \lambda = 0, 2, 4, 6, \dots$	$\delta_{m,m'}, \delta_{P,P'}$	$m^P, P = (-)^l$
Triángulo $\mu = \pm 2\kappa, \lambda = 0, 2, 3, 4, \dots$ $\kappa = 0, 1, 2, \dots$	$\delta_{m,m' \pm 2\kappa}$	$m, m \pm 2, m \pm 4, \dots$ $m \pm 1, m \pm 3, m \pm 5, \dots$
Tetraedro $\mu = \pm 3\kappa, \lambda = 0, 3, 4, 6, \dots$ $\kappa = 0, 1, 2, \dots$	$\delta_{m,m' \pm 3\kappa}$	$m, m \pm 3, m \pm 6, \dots$ $m \pm 1, m \pm 4, m \pm 7, \dots$ $m \pm 2, m \pm 5, m \pm 8, \dots$

Para el caso del dumbbell encontramos que solo los multipolos pares con  $\mu = 0$  devuelven valores diferentes de cero, entonces la condición para los elementos de matriz es  $\delta_{m,m'}$ . Además como sólo son permitidos  $\lambda$  pares se conserva también la paridad, por lo que además de la condición sobre  $m$  se añade que los elementos de matriz también tiene que cumplir la condición  $\delta_{P,P'}$ . Ambas condiciones permiten dividir la matriz de  $H$  en pequeños bloques de matrices diagonales en  $m$  y la paridad  $P$ . En lugar de resolver una matriz con todos los elementos se resuelven pequeños bloques de matrices de  $H$  por separado. Esto aumenta la eficiencia de los cálculos al calcular matrices de dimensiones mucho menores que la que contiene todos los elementos.

En el caso del triángulo no se conserva ninguno de los números cuánticos usuales, ni tampoco la paridad. Sin embargo es también posible dividir en bloques matriciales a  $H$ . Esto es gracias a las condiciones sobre los multipolos provenientes del factor geométrico. Para el caso de tres cuerpos  $\mu = \pm 2\kappa$ , donde  $\kappa = 0, 1, 2, \dots$ , lo cual impone una condición para los elementos de matriz diferentes de cero,  $\delta_{m,m' \pm 2\kappa}$ . Esta condición hace que  $H$  se divida en un bloque donde solo aparecen estados con proyecciones  $m, m \pm 2, m \pm 4, \dots$ , y otro donde solo aparecen estados con proyecciones  $m \pm 1, m \pm 3, m \pm 5, \dots$ .

Al igual que en el caso del triángulo, en el tetrahedro se puede dividir también a  $H$  en bloques matriciales e igualmente tampoco se conserva ningún número cuántico. La condición sobre los multipolos aquí es  $\mu = \pm 3\kappa$ , que impone la condición  $\delta_{m,m' \pm 3\kappa}$  sobre los elementos de matriz de  $H$ . Los bloques matriciales en los que se puede dividir a  $H$  son uno donde solo aparecen estados con proyecciones  $m, m \pm 3, m \pm 6, \dots$ , otro donde solo aparecen aquellos estados con  $m \pm 1, m \pm 4, m \pm 7, \dots$ , y por último otro bloque con solo aquellos que tengan  $m \pm 2, m \pm 5, m \pm 8, \dots$ . Estos resultados estan resumidos en la tabla 2.1. La división en bloques de  $H$  es una evidencia directa de la importancia e influencia del factor geométrico.

Diagonalizando cada bloque matricial calculamos las energías  $\epsilon_\Omega$  y los coeficientes de expansión de las funciones de ondas intrínsecas,  $\chi_\Omega$ , en la base del oscilador armónico

$$|\chi_\Omega\rangle = \sum_{m,j,l,n} a_{mjl\frac{1}{2}n} |m, j, l, 1/2, n\rangle \quad (2.24)$$

donde  $\Omega$  son las etiquetas de los estados. Las entradas principales del programa son los valores de  $V_0, V_{0,so}$  y  $\alpha$ . Estos tres parámetros se ajustan usando tanto valores experimentales como consideraciones teóricas, ajustar  $\alpha$  además ajusta a  $\nu$  el cual se realiza normalmente por el número másico,  $A$ . Estos tres parámetros determinan completamente el CSM, siendo cada uno de los aspectos determinados por ellos. Los valores tomados para  $V_0, V_{0,so}$  y  $\alpha$  son los propuestos por [19], donde se realiza un estudio de cómo conseguirlos. Los otros dos factores son  $n$  y  $\beta$ , que serán nuestros parámetros de control. La distancia al centro de masa,  $\beta$ , se tomará como el parámetro de deformación, objeto central en nuestro estudio pues el desdoblamiento de niveles dependerá de él. Por otra parte el número de las capas del oscilador armónico,  $n$ , influenciará la convergencia de las soluciones de las energías y las funciones de onda intrínsecas. Este parámetro tiene una cierta relación con  $\beta$ , pues al aumentar la deformación se necesitan de más capas para que se pueda asegurar la convergencia de la solución numérica.

# Capítulo 3

## Resultados

En los siguientes capítulos presentaremos el trabajo de representación de grupos en el que propondremos una simetría del sistema, el cual entonces ha de esperarse que el sistema se desdoble según los resultados encontrados por ese trabajo. Seguidamente presentaremos los diagramas de correlación para cada configuración de cúmulos, mostrando los cambios de los niveles de energía al variar la distancia al centro de masas,  $\beta$ . Se mostrará además el cambio de las mezclas entre niveles en dependencia de  $\beta$  igualmente. Gracias a esto podremos ser capaces en los casos del triángulo y el tetrahedro separar grupos de simetría diferentes de manera numérica. De esta forma podremos ser capaces de confirmar el grupo de simetría con el resultado numérico, y dar una interpretación a los resultados.

### 3.1. Etiqueta de estados

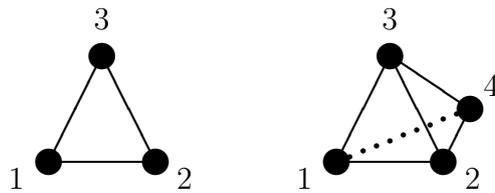
Para la etiqueta de estados son usados los números cuánticos pero no siempre esto es posible. Nuestro problema es uno de esos casos. Para poder etiquetar los estados es necesario entonces encontrar la resolución de la representación del momento angular total en las representaciones irreducibles de los grupos de simetría puntual acordes con el problema. De esta forma podemos etiquetar los estados desdoblados debidos a las configuraciones geométricas presentadas en la figura 2.1.

#### 3.1.1. Grupos de simetría

Las configuraciones geométricas usadas en este trabajo (figura 2.1) tienen ya identificados los grupos de simetría que les corresponde. Sin embargo para el caso del dumbbell no vamos en este trabajo a hacer uso de su grupo ni de su representación irreducible pues para etiquetar los estados tenemos otros números cuánticos que nos servirán para este propósito. Por otro lado para el caso del triángulo y el tetraedro no los tenemos, por lo que se ha de usar las representaciones irreducibles de los grupos de simetría acordes a cada

una de las configuraciones geométricas puntuales cristalográficas para etiquetar los estados bivaluados (diferenciados de los univaluados por '). En nuestro caso al encontrarnos en el marco de referencia del centro de masa solo existen rotaciones de simetría, no traslaciones ni inversiones, por tanto los grupos rotacionales puros  $T$  y  $D_3$  son los correctos a usar, que son ambos subgrupos de  $T_d$  y  $D_{3h}$ , estos últimos contienen todas las operaciones de simetría correspondientes al tetraedro y al triángulo respectivamente. Sin embargo  $T$  y  $D_3$  no nos sirven pues no contienen las propiedades para expresar el efecto de un spin semientero. Para esto se necesitan en su lugar grupos rotacionales puros cristalográfico  $T'$  y  $D'_3$ , que a su vez son subgrupos de  $T'_d$  y  $D'_{3h}$ . Encontrar las representaciones irreducibles para el caso general es un trabajo ya hecho, en el marco presente solo mostraremos un resumen y los resultados de realizar esto para el sistema en cuestión. Una explicación completa se encuentra en [21] y [22].

Primero se han de identificar las transformaciones de simetría para tanto el triángulo como el tetraedro. Al encontrarnos en el sistema de referencia de centro de masa solo tenemos presentes transformaciones de simetría asociadas a rotaciones. De la figura 3.1 podemos encontrar los ejes de simetría para las rotaciones donde un eje  $n$ -múltiplo corresponde a rotaciones de ángulos  $\phi_n = \frac{2\pi}{n}$ . Aquí encontramos que existen para el triángulo tres ejes de simetría para rotaciones de  $\pi$  radianes. Estos ejes pasan por el centro de masa de las partículas  $i - j$  y la partícula  $k$ . Un ejemplo, un eje pasa por el centro de masa de las partículas 1-3 y la partícula 2. Este eje es denominado eje doble. El otro eje es para una rotación de  $\frac{2\pi}{3}$  radianes, que atraviesa al plano de las tres partículas de manera perpendicular y pasa por el centro de masa de las tres. Este eje se denomina triple. Para el tetraedro tenemos tres ejes dobles y cuatro ejes triples. Los ejes triples pasan por una partícula  $i$  y por el centro de masa de las otras  $j - k - l$ , por ejemplo el que pasa por 4 y por el centro de masa de 1-2-3. Los ejes dobles pasan por el punto medio de uno de los lados del tetraedro entre dos partículas  $i - j$  y el punto medio del lado contrario a  $i - j$ , entre las partículas  $k - l$ . Por ejemplo un eje es el que pasa por el punto medio entre las partículas 1-2 y atraviesa el punto medio del lado contrario, entre las partículas 3-4.



**Figura 3.1:** Configuraciones geométrica puntuales.

Conociendo esto podemos encontrar los caracteres de la representación del momento angular de nuestro problema usando

$$\chi^{(j)}(\phi) = \sum_{m=-j}^j e^{im\phi} = \frac{\sin(j + 1/2)\phi}{\sin \phi/2}. \quad (3.1)$$

Acorde con la ecuación 3.1 podemos encontrar los caracteres de la representación del momento angular total. Al realizar la resolución en los grupos  $T'$  y  $D'_3$ , los caracteres obtenidos tienen que ser iguales a los de la representación del momento angular total.

Los caracteres de nuestro problema, usando la ecuación 3.1 son

$$\begin{aligned}
 \phi_1 = 0, 2\pi : \chi^{(j)}(\phi_1) &= 2j + 1 \\
 \phi_2 = \pi : \chi^{(j)}(\phi_2) &= 0 \\
 \phi_3 = \frac{2\pi}{3} : \chi^{(j)}(\phi_3) &= \frac{\sin(j + 1/2)\pi/3}{\sin \pi/6} = \dots \begin{cases} 1 & \text{para } j \pmod{3} = \frac{1}{2} \\ -1 & \text{para } j \pmod{3} = \frac{3}{2} \\ 0 & \text{para } j \pmod{3} = \frac{5}{2} \end{cases}
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

donde para  $\phi_3$  existe una cierta periodicidad. En la tabla 3.1 se ve un resumen del resultado anterior para valores explícitos de  $j$ .

**Tabla 3.1:** Caracteres de la representación del momento angular total  $D^{(j)}$ .

$j$	$1/2$	$3/2$	$5/2$	$7/2$	$9/2$	$11/2$
$\chi^{(j)}(\phi_1)$	2	4	6	8	10	12
$\chi^{(j)}(\phi_2)$	0	0	0	0	0	0
$\chi^{(j)}(\phi_3)$	1	-1	0	1	-1	0

Ahora necesitamos los caracteres de la representaciones irreducibles de los grupos  $D'_3$  y  $T'$ . En las tablas 3.2 y 3.3 se muestran estos. Encima se encuentran las clases del grupo, que corresponden a una operación de simetría (rotaciones) con los que se calculan estos caracteres para ambos grupos. En la notación  $C_n(A)$ ,  $n$  hace referencia al tipo de eje sobre el que se rota (simple, doble, etc.) y  $A$  la cantidad de estos ejes. Por tanto  $C_2(3)$  sería una rotación sobre uno de los tres ejes dobles, por lo cual el caracter que le corresponde sería  $\chi(\phi_2)$ .  $E$  corresponde a la transformación identidad por lo que le corresponde  $\chi(\phi_1)$ .

**Tabla 3.2:** Caracteres de la representaciones del grupo  $D'_3$ .

	$E$	$C_2(3)$	$C_3(1)$
$E'_1$	2	0	-2
$E'_2$	2	0	1

**Tabla 3.3:** Caracteres de la representaciones del grupo  $T'$

	$E$	$C_2(3)$	$C_3(4)$
$E'$	2	0	1
$G'$	4	0	-1

### 3.1.2. Etiqueta de estados intrínsecos

Ahora es posible hacer la resolución de  $D^{(j)}$  solucionando para cada caracter de  $D^{(j)}$  en el caso del triángulo este sistema

$$\begin{aligned}
 \chi^{(j)}(\phi_1) &= 2N_{E'_1} + 2N_{E'_2} \\
 \chi^{(j)}(\phi_2) &= 0 \\
 \chi^{(j)}(\phi_3) &= -2N_{E'_1} + N_{E'_2}
 \end{aligned} \tag{3.3}$$

o en el caso del tetraedro

$$\begin{aligned}
 \chi^{(j)}(\phi_1) &= 2N_{E'} + 4N_{G'} \\
 \chi^{(j)}(\phi_2) &= 0 \\
 \chi^{(j)}(\phi_3) &= N_{E'} - N_{G'}.
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Donde  $N_A$  es la cantidad de representaciones necesarias para obtener los valores de los caracteres de  $D^{(j)}$ . Para  $\phi_2$  se satisface automáticamente. Un resumen de la resolución obtenida esta mostrada en la tabla 3.4.

**Tabla 3.4:** Resolución de  $D^{(j)}$  en las representaciones irreducible de los grupos  $D'_3$  y  $T'$ .

$j$	$\chi^{(j)}(\phi_1)$	$\chi^{(j)}(\phi_3)$	Resolución en las representaciones irreducibles de $D'_3$	Resolución en las representaciones irreducibles de $T'$
$1/2$	2	1	$E'_2$	$E'$
$3/2$	4	-1	$E'_1 + E'_2$	$G'$
$5/2$	6	0	$E'_1 + 2E'_2$	$E' + G'$
$7/2$	8	1	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_2$	$(E' + G') + E'$
$9/2$	10	-1	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_1 + E'_2$	$(E' + G') + G'$
$11/2$	12	0	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_1 + 2E'_2$	$(E' + G') + E' + G'$

De esta forma los estados desdoblados debido a la deformación  $\beta$  serán dos series de dobletes etiquetados como  $E'_1$  y  $E'_2$  en el caso del triángulo. En el caso del tetraedro serán una serie de dobletes con una serie de cuadrupletes etiquetados como  $E'$  y  $G'$  respectivamente. Debido a la periodicidad del caracter  $\chi^{(j)}(\phi_3)$  podemos obtener una ecuación de recurrencia tanto para  $D'_3$

$$\begin{aligned}
D^{(1/2)} &= E'_2 \\
D^{(3/2)} &= E'_1 + E'_2 \\
D^{(5/2)} &= E'_1 + 2E'_2 \\
D^{(j)} &= D^{(j-3)} + E'_1 + 2E'_2
\end{aligned} \tag{3.5}$$

como para  $T'$

$$\begin{aligned}
D^{(1/2)} &= E' \\
D^{(3/2)} &= G' \\
D^{(5/2)} &= E' + G' \\
D^{(j)} &= D^{(j-3)} + E' + G'.
\end{aligned} \tag{3.6}$$

**Acoplamiento LS:** Otra variante para obtener el mismo resultado anterior es obteniendo primero la representación del momento angular orbital  $l$  ( $D^{(l)}$ ) realizando el mismo trabajo pero en los grupos univaluados  $D_3$  y  $T$ . Después haciendo el producto entre la representación  $D^{(l)}$  y aquella para el spin de la partícula independiente que sería  $D^{(1/2)}$ , obtendríamos los caracteres para  $D^{(j)}$ . A su vez, el producto de la resolución de  $D^{(l)}$  en los grupos  $D_3$  y  $T$  con la resolución de  $D^{(1/2)}$  en los grupos  $D'_3$  y  $T'$  nos dará la resolución de  $D^{(j)}$ .

Al igual que el caso anterior obtenemos una tabla con los valores de los caracteres para  $D^{(l)}$  con la misma ecuación 3.1 pero sustituyendo  $l$  por  $j$ . Los valores estan resumidos en la tabla 3.5

**Tabla 3.5:** Caracteres de la representación del momento angular  $D^{(l)}$ .

$l$	0	1	2	3	4	5	6	7
$\chi^{(l)}(\phi_1)$	1	3	5	7	9	11	13	15
$\chi^{(l)}(\phi_2)$	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
$\chi^{(l)}(\phi_3)$	1	0	-1	1	0	-1	1	0

Igualmente necesitamos los caracteres de la representaciones irreducibles pero de los grupos  $D_3$  y  $T$ . Estos aparecen en las tablas 3.6 y 3.7.

**Tabla 3.6:** Caracteres de la representaciones del grupo  $D_3$ .

	$E$	$C_2(3)$	$C_3(1)$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	-1	1
$E$	2	0	-1

**Tabla 3.7:** Caracteres de la representaciones del grupo  $T$

	$E$	$C_2(3)$	$C_3(4)$
$A$	1	1	1
$E$	2	2	-1
$F$	3	-1	0

Para obtener la resolución se resuelve para el triángulo el sistema

$$\begin{aligned}
 \chi^{(l)}(\phi_1) &= N_{A_1} + N_{A_2} + 2N_E \\
 \chi^{(l)}(\phi_2) &= N_{A_1} - N_{A_2} \\
 \chi^{(l)}(\phi_3) &= N_{A_1} + N_{A_2} - N_E
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

y para el tetrahedro

$$\begin{aligned}
 \chi^{(l)}(\phi_1) &= N_A + 2N_E + 3N_F \\
 \chi^{(l)}(\phi_2) &= N_A + 2N_E - N_F \\
 \chi^{(l)}(\phi_3) &= N_A - N_E.
 \end{aligned}
 \tag{3.8}$$

Asi entonces obtenemos la resolución de  $D^{(l)}$  en los grupos  $D_3$  y  $T$ . En la tabla 3.8 se resumen los resultados

**Tabla 3.8:** Resolución de  $D^{(l)}$  en las representaciones irreducible de los grupos  $D_3$  y  $T$ .

$l$	$\chi^{(l)}(\phi_1)$	$\chi^{(l)}(\phi_2)$	$\chi^{(l)}(\phi_3)$	Resolución en las representaciones irreducibles de $D_3$	Resolución en las representaciones irreducibles de $T$
0	1	1	1	$A_1$	$A$
1	3	0	-1	$A_2 + E$	$F$
2	5	-1	1	$A_1 + 2E$	$E + F$
3	7	1	-1	$A_1 + 2A_2 + 2E$	$A + 2F$
4	9	0	1	$2A_1 + A_2 + 3E$	$A + E + 2F$
5	11	-1	-1	$A_1 + 2A_2 + 4E$	$E + 3F$

Sólo nos resta encontrar ahora la representación para el sistema de acoplamiento  $LS$ , o sea  $D = D^{(l)} \times D^{(1/2)}$ . Para ello hacemos uso de un resultado de la página 116 de [22]. Sea  $W$  una transformación de grupo, entonces los caracteres de un producto de representaciones es el producto de los caracteres de cada representación, o sea

$$\chi(W) = \chi^{(\lambda)}(W) \chi^{(\mu)}(W). \quad (3.9)$$

Usemos como ejemplo el producto de las representaciones  $A_1$  y  $E'_2$  de los grupos  $D_3$  y  $D'_3$

$$\begin{aligned} \chi(\phi_1) &= \chi^{(l)}(\phi_1) \chi^{(1/2)}(\phi_1) = 2 \\ \chi(\phi_2) &= \chi^{(l)}(\phi_2) \chi^{(1/2)}(\phi_2) = 0 \\ \chi(\phi_3) &= \chi^{(l)}(\phi_3) \chi^{(1/2)}(\phi_3) = 1 \\ \therefore A_1 \times E'_2 &= E'_2. \end{aligned} \quad (3.10)$$

En la tabla 3.9 aparecen todos los productos entre las representaciones de los grupos  $T$  y  $T'$  al igual que los grupos  $D_3$  y  $D'_3$ .

**Tabla 3.9:** Productos de las representaciones de  $T$  con  $T'$  y de  $D_3$  con  $D'_3$

$T \otimes T'$	$D_3 \otimes D'_3$
$A \times E' = E'$	$A_1 \times E'_2 = E'_2$
$E \times E' = G'$	$A_2 \times E'_2 = E'_2$
$F \times E' = E' + G'$	$E \times E'_2 = E'_1 + E'_2$
$A \times G' = G'$	$A_1 \times E'_1 = E'_1$
$E \times G' = 2E' + G'$	$A_2 \times E'_1 = E'_1$
$F \times G' = 2E' + 2G'$	$E \times E'_1 = 2E'_2$

Como se mencionó anteriormente vamos a obtener la representación del momento angular total,  $D^{(j)}$ , a través del acoplamiento  $LS$ , o sea usando que  $D = D^{(l)} \times D^{(1/2)}$ . Conociendo como obtener los caracteres de un producto de representaciones obtenemos

$$\begin{aligned}
D^{(0)} \times D^{(1/2)} &= D^{(1/2)} \\
D^{(1)} \times D^{(1/2)} &= D^{(1/2)} + D^{(3/2)} \\
D^{(2)} \times D^{(1/2)} &= D^{(3/2)} + D^{(5/2)} \\
D^{(3)} \times D^{(1/2)} &= D^{(5/2)} + D^{(7/2)} \\
&\dots
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Los caracteres  $D^{(j)}$  los podemos obtener conociendo  $D^{(j-1)}$ . Por otra parte la resolución se obtiene de realizar el producto de la resolución de  $D^{(l)}$  por la resolución de  $D^{(1/2)}$  en los grupos correspondientes. Para el triángulo el resultado es

$$\begin{aligned}
A_1 \times E'_2 &= E'_2 \\
A_2 \times E'_2 + E \times E'_2 &= E'_1 + 2E'_2 \\
A_1 \times E'_2 + 2E \times E'_2 &= 2E'_1 + 3E'_2 \\
A_1 \times E'_2 + 2A_2 \times E'_2 + 2E \times E'_2 &= 2E'_1 + 5E'_2 \\
&\dots
\end{aligned} \tag{3.12}$$

y para el tetraedro

$$\begin{aligned}
A \times E' &= E' \\
F \times E' &= E' + G' \\
E \times E'_2 + F \times E' &= E' + 2G' \\
A \times E'_2 + 2F \times E' &= 2E' + G' \\
&\dots
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Al igual que los caracteres, la resolución de  $D^{(j)}$  se obtiene conociendo la resolución  $D^{(j-1)}$ . De esta forma volvemos a obtener los resultados de la tabla 3.4.

## 3.2. Resultados numéricos

Los resultados numericos partieron de resolver la ecuación (2.17). La precisión del cálculo numérico depende del número de capas del oscilador armónico que tomemos,  $n$ . Este valor es necesario aumentarlo debido a dos razones principales: primero si queremos conocer niveles de energía mas elevados; segundo si aumentamos  $\beta$ . Al mantenernos en el límite esférico, si queremos conocer los valores de niveles de energía mas altos, obviamente se ha

de truncar la base para un  $n$  más alto. Al aumentar  $\beta$ , el potencial está más deformado y aumenta la interacción, la mezcla entre estados de la misma simetría aumenta. Los niveles de energía superiores se mezclan más con el resto de los niveles, influyendo más en la interacción. Por ende para tener una buena aproximación para los niveles inferiores a mayor  $\beta$  hace falta aumentar  $n$ . Si se decide conocer los estados superiores para un  $\beta$  cada vez mayor, se necesita de un  $n$  incluso mayor que para niveles inferiores. En nuestro trabajo, con un  $n = 15$  ya nos era suficiente para calcular hasta  $\beta = 6 fm$ , donde nos interesan los primeros estados.

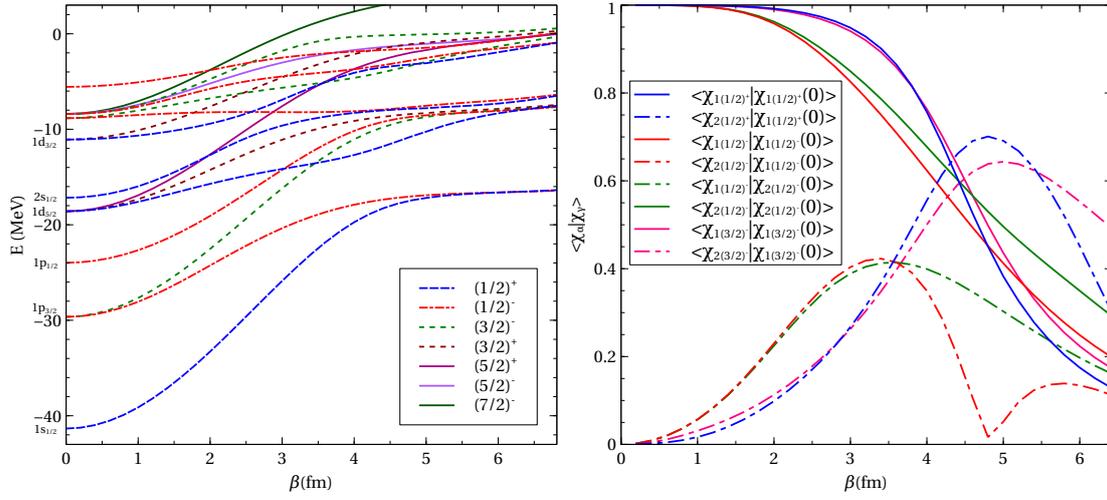
### 3.2.1. Caso Dumbbell

En esta configuración  $k = 2$ , cuya simetría es de  $Z_2$ , tenemos como buenos números cuánticos a la paridad y la proyección del momento angular total sobre el eje de simetría  $K$ , cuyos valores permitidos son los mismos que para la proyección  $m$ . Los niveles con proyección  $\pm m$  están degenerados. Por consecuencia, un nivel  $(l^{1/2})_j$  se desdobra en una serie de dobletes  $m = 1/2, 3/2, \dots, j$  con paridad  $P = (-)^l$ .

Como fue mencionado en la sección anterior, la matriz que se obtiene de la ecuación (2.17) se puede separar en bloques, de acuerdo con Table 2.1 on page 13. Esto conlleva a que los estados que no pertenecen a un bloque no se puede mezclar con otros que si pertenezcan. Entonces los estados desdoblados que se van a mezclar son aquellos con igual proyección y paridad.

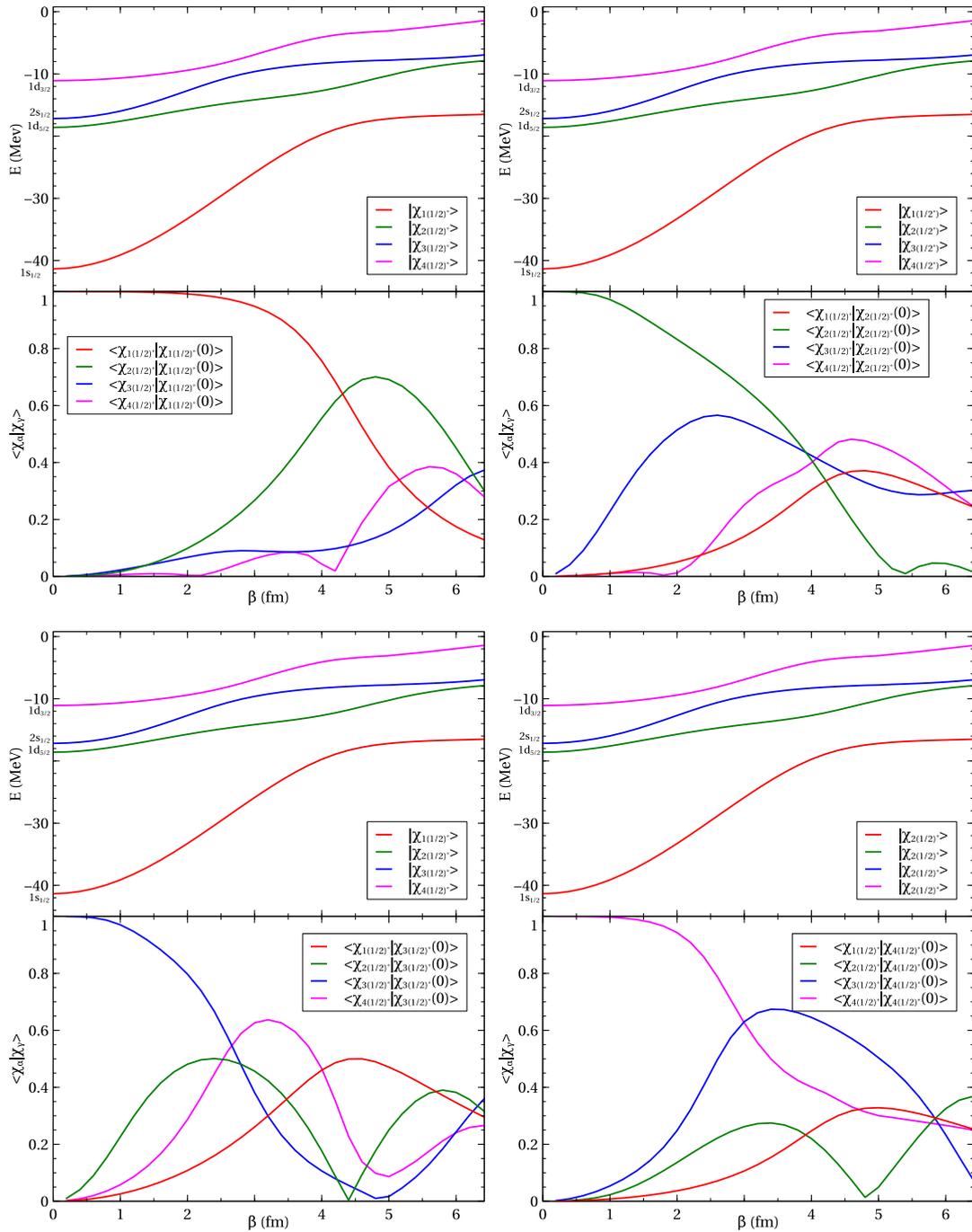
En la figura 3.2 se muestran los niveles de energía y su desdoblamiento mientras se varía  $\beta$  y la mezcla entre diferentes autovectores de diferentes niveles de energía. Para realizar este último gráfico se estudia el traslape entre estados intrínsecos de diferentes deformaciones,  $\langle \chi_\gamma(\beta) | \chi_{\gamma'}(\beta') \rangle$ . Podemos entonces tomar como estado de referencia uno con un  $\beta'$  definido, en específico  $\beta' = 0$ . De esta forma podemos estudiar la mezcla entre estados a medida que variamos  $\beta$ . Lo primero que se nota es que todas las mezclas tienen un comportamiento continuo y suave. Por tanto la interacción entre los estados de misma simetría proceden de la misma forma.

Por otra parte, los estados que más se mezclan son aquellos que pertenecen a los grupos con mayor densidad de estados y que tienen menor distancia energética entre sí. Ejemplos de estos son los estados  $|\chi_{1(1/2)^-}(\beta)\rangle$  y  $|\chi_{1(1/2)^-}(\beta)\rangle$ . Para ver con más claridad tomaremos como ejemplo los estados desdoblados provenientes de las capas esféricas hasta  $1d_{3/2}$ . En las figuras 3.3 y 3.4 se muestran, para diferentes grupos de estados correspondientes a diferentes simetría, las mezclas entre los estados del mismo grupo. Encima se muestra el diagrama de correlación lo que nos facilita interpretar los resultados. Se graficaron para los diagramas de correlación solo las curvas pertenecientes a cada grupo y exceptuando los niveles que provenían por encima de el nivel esférico  $1d_{3/2}$ . Para los traslapes con respecto al estado de referencia, sin embargo, se tomó en cada caso cuatro estados .

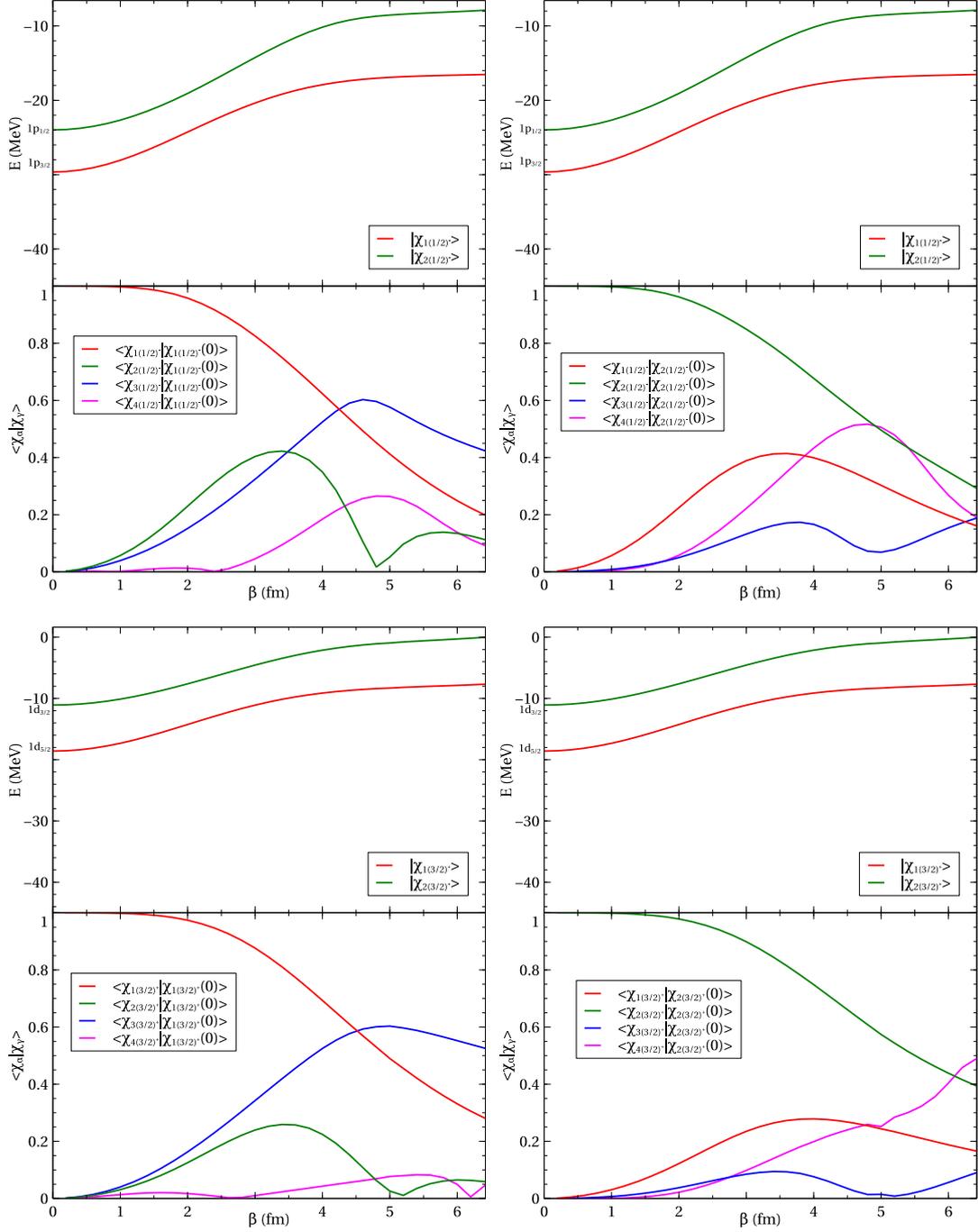


**Figura 3.2:** Se muestra el diagrama de correlación obtenido de resolver ecuación(2.17) para el caso de dos cuerpos. La etiqueta de los estados fue usando la paridad  $P = (-)^l$  y  $K$ . Para el cálculo de los niveles de energía se usó  $V_0 = 32$  MeV,  $V_{0,so} = 27,5$  MeV fm<sup>2</sup> y  $\alpha = 0,0511$  fm<sup>-2</sup>.

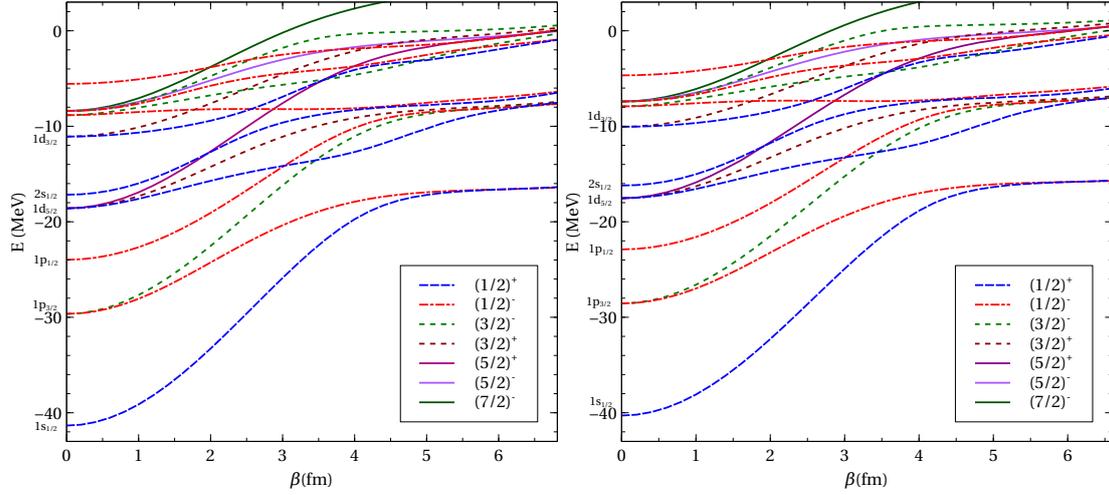
Lo primero que se puede notar de la figuras 3.3 y 3.4 es que las curvas donde  $\langle \chi_\gamma(\beta) | \chi_\gamma(0) \rangle$ , o sea aquellos productos internos que son de un estado consigo mismo pero para un  $\beta$  fijo, inician en 1 y decrecen. Estas curvas muestran cuanto se ha mezclado el estado en general y nos permite comparar que estados se han mezclado mas.



**Figura 3.3:** Traslape de los cuatro primeros estados del grupo  $(1/2)^+$ . Cada grfica muestra en la parte superior el diagrama de correlaci3n para los cuatro estados, abajo muestra la mezcla de estos estados variando  $\beta$  con respecto a un estado con  $\beta = 0$ . Se toman como estados fijos a  $|\chi_{1(1/2)^+}(\beta = 0)\rangle$  (izquierda arriba),  $|\chi_{2(1/2)^+}(\beta = 0)\rangle$  (derecha arriba),  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta = 0)\rangle$  (izquierda abajo) y  $|\chi_{4(1/2)^+}(\beta = 0)\rangle$  (derecha abajo).



**Figura 3.4:** Traslape de los cuatro primeros estados de los grupos  $(1/2)^-$  y  $(3/2)^+$ . Cada gráfica muestra en la parte superior el diagrama de correlación para los estados, excepto los niveles provenientes de niveles esféricos por encima de  $1d_{3/2}$ . Abajo muestra la mezcla de estos estados variando  $\beta$  con respecto a un estado con  $\beta = 0$ . Se toman como estados fijos a  $|\chi_{1(1/2)^-}(\beta = 0)\rangle$  (izquierda arriba),  $|\chi_{2(1/2)^-}(\beta = 0)\rangle$  (derecha arriba),  $|\chi_{1(3/2)^+}(\beta = 0)\rangle$  (izquierda abajo) y  $|\chi_{2(3/2)^+}(\beta = 0)\rangle$  (derecha abajo).



**Figura 3.5:** Comparación entre los resultados obtenidos de la ecuación 2.17 para neutrones (izquierda) y para protones (derecha).

De aquí se nota que el estado  $|\chi_{1(1/2)^+}(\beta)\rangle$  es el que menos se mezcla en comparación con los otros. Esto es debido a que este estado está más alejado de los otros, energéticamente, por lo que se mezcla poco con los estados superiores. Mientras aumenta  $\beta$ ,  $|\chi_{1(1/2)^+}(\beta)\rangle$  va acercándose más a los estados superiores, aumentando la mezcla y por tanto  $\langle \chi_{1(1/2)^+}(\beta) | \chi_{1(1/2)^+}(0) \rangle$  va disminuyendo. El estado que más se mezcla es  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$ . Este estado en particular siempre está cerca de algún otro estado, primero con  $|\chi_{2(1/2)^+}(\beta)\rangle$  y después con  $|\chi_{4(1/2)^+}(\beta)\rangle$ .  $|\chi_{2(1/2)^+}(\beta)\rangle$  y  $|\chi_{4(1/2)^+}(\beta)\rangle$  cambia el comportamiento de sus mezclas justamente debido a  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$ . Primero para  $\beta < 3$  fm  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$  y  $|\chi_{2(1/2)^+}(\beta)\rangle$ , pero al suceder esto  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$  se acerca a  $|\chi_{4(1/2)^+}(\beta)\rangle$  aumentando la mezcla entre estos dos hasta  $\beta = 2.5$  fm donde ya está más cerca  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$  de  $|\chi_{4(1/2)^+}(\beta)\rangle$  que a  $|\chi_{2(1/2)^+}(\beta)\rangle$ . Este efecto de  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$  se puede notar claramente al comparar  $\langle \chi_{2(1/2)^+}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle$  con  $\langle \chi_{4(1/2)^+}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle$  y fijándose en el diagrama de correlación encima. Hasta  $\beta = 2$  fm tenemos que  $\langle \chi_{2(1/2)^+}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle < \langle \chi_{4(1/2)^+}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle$ , cuando  $\beta = 2.5$  fm  $\langle \chi_{4(1/2)^+}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle$  se acerca a la curva  $\langle \chi_{2(1/2)^+}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle$  y cuando  $\beta = 3$  fm obtenemos entonces  $\langle \chi_{2(1/2)^+}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle > \langle \chi_{4(1/2)^+}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle$ . Esto se vuelve a invertir para  $\beta = 4$  fm, donde se vuelven a acercar y después de 4 fm vuelve  $\langle \chi_{2(1/2)^+}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle$  a ser menor. Al com-

parar con el diagrama de correlación se aprecia que justo en estos cambios ocurren cuando  $|\chi_{3(1/2)^+}(\beta)\rangle$  se distancia de  $|\chi_{2(1/2)^+}(\beta)\rangle$  y se acerca a  $|\chi_{4(1/2)^+}(\beta)\rangle$  y viceversa. Lo dicho anteriormente se puede corroborar al comparar  $\langle \chi_{3(1/2)^+}(\beta) | \chi_{1(1/2)}(0) \rangle$ ,  $\langle \chi_{3(1/2)}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle$  y  $\langle \chi_{3(1/2)}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle$ , que reflejan mezcla directa entre estados. Hasta  $\beta = 5$  fm  $\langle \chi_{3(1/2)^+}(\beta) | \chi_{1(1/2)}(0) \rangle$  es el de menor valor, mientras que hasta 2.5 fm  $\langle \chi_{3(1/2)}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle > \langle \chi_{3(1/2)}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle$  y de 3 a 6 fm  $\langle \chi_{3(1/2)}(\beta) | \chi_{4(1/2)^+}(0) \rangle < \langle \chi_{3(1/2)}(\beta) | \chi_{2(1/2)^+}(0) \rangle$ .

De la figura 3.4 se puede extraer comportamiento similar. Pero al comparar las figuras 3.3 y 3.4 entre si se ve claro que excepto  $|\chi_{1(1/2)^+}(\beta)\rangle$ , todos los otros estados de  $(1/2)^+$  evidencian una mayor mezcla que los estados de  $(1/2)^-$  y  $(3/2)^+$ . Esto sucede debido a la densidad de estados, que provoca que para los estados de  $(1/2)^-$  y  $(3/2)^+$  como tienen menos estados, estos van a estar más alejados entre si. A su vez el grupo de  $(1/2)^-$  se mezcla más que el de  $(3/2)^+$ .

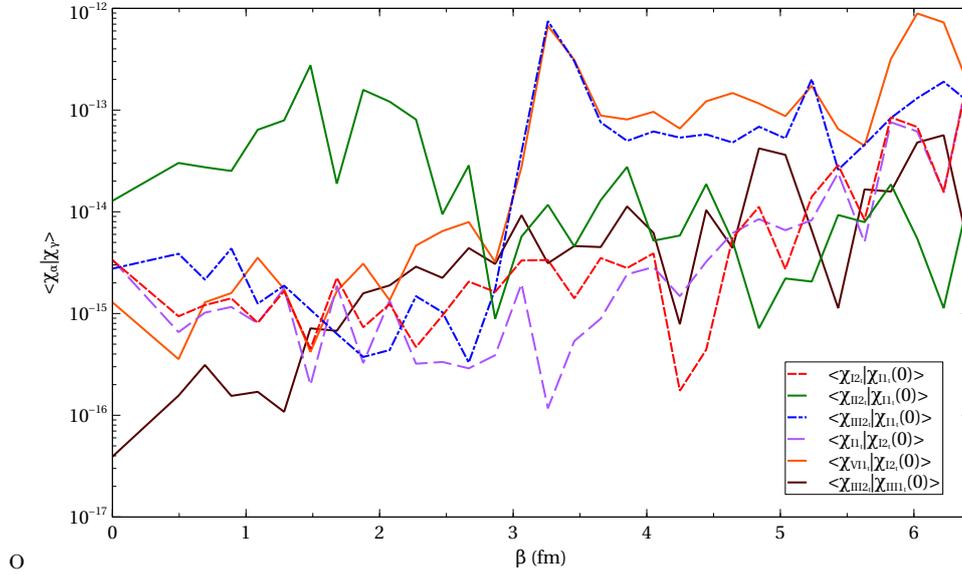
Para identificar en que región es que empieza a cambiar de un objeto único (un solo núcleo) a varios fragmentos se necesita usar de tanto la mezcla como del diagrama de correlación. En el caso del dumbbell esta región de cambio de fase se encuentra entre 3 a 4.5 fm. En esta región en donde más mezcla entre estados ocurre, además se puede apreciar de figura 3.2 que en esta zona es donde los niveles de energía más se cruzan entre si. Otra región de interés es después de 5 fm. A partir de 5 fm los niveles de energía empiezan a converger asintóticamente hacia ciertos valores, reflejándose una estructura de niveles igual que para  $\beta = 0$ , solo que en energías más altas y con mayor degeneración. Tanto la estructura como la degeneración son características que reflejan que el núcleo ya se deformó en dos fragmentos separados, en nuestro caso partículas alfa.

La diferencia entre neutrones o protones sólo se debe al término coulombiano en la ecuación (2.17). En la figura 3.5 se comparan los diagramas de correlación considerando como partícula libre un neutrón (izquierda) y un protón (derecha). Como se evidencia, para la interacción entre nucleón-alfa no afecta en el comportamiento. Sólo ocurre un desplazamiento vertical de los niveles para el caso del protón en comparación con el caso del neutrón. O sea con estudiar uno de los casos se puede extrapolar directamente hacia el otro.

Por último en la figura 3.6 se muestran los resultados de acotar la suma sobre los multipolos de la ecuación (2.17). Se puede apreciar claramente que para el dumbbell basta tomar la suma hasta  $\lambda_{max} = 2$  en la región cercana a  $\beta = 2$  fm, mientras que para poder reproducir completamente el gráfico haría falta incluir también a  $\lambda_{max} = 4$  y para mejorar la precisión después de  $\beta = 6$  fm basta hasta  $\lambda_{max} = 6$ .



### 3.2.2. Caso Triángulo



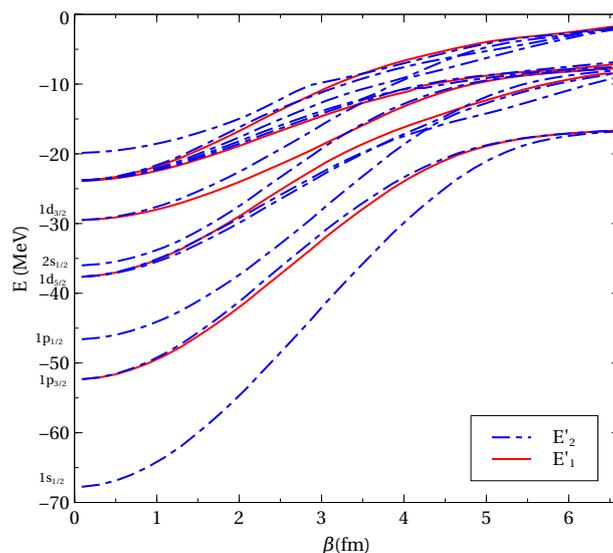
**Figura 3.7:** Valor de mezclas entre estados de simetría diferentes para el caso de tres cúmulos. Con este resultado se pueden separar los estados pertenecientes a representaciones diferentes del mismo grupo de simetría. En la leyenda se muestra que los estados pertenecen a dos representaciones diferentes, pero no se ha hecho todavía la identificación de estos con la resolución de la tabla 3.4.

Para la configuración del triángulo equilátero tenemos  $k = 3$ . Para esta configuración la simetría correspondiente es  $D_3'$ , como se explicó en la sección 3.1. En este caso no se conservan ni el momento angular ni la paridad y la resolución teórica obtenida en el apartado 3.1.2 muestra que un nivel  $(l^{1/2})_j$  se desdobra en dos tipos de dobletes. Para verificar numéricamente esto se hizo uso de los traslapes entre estados explicados en el apartado 3.2.1, que nos dice la mezcla de los estados.

Para separar grupos de estados pertenecientes a representaciones de simetría diferentes hacemos uso de las mezclas, estados pertenecientes a tipos de representaciones diferentes no se podrían mezclar. Este efecto es independiente de la deformación del campo potencial pues el principal causante de la resolución de los estados es la simetría presente en la configuración geométrica y el factor geométrico, como se muestra en el apartado 2.1.1, es independiente del parámetro de deformación,  $\beta$ . Entonces las gráficas de traslapes, que dependen de  $\beta$ , tienen que devolver valores de cero para todo el rango de  $\beta$  que

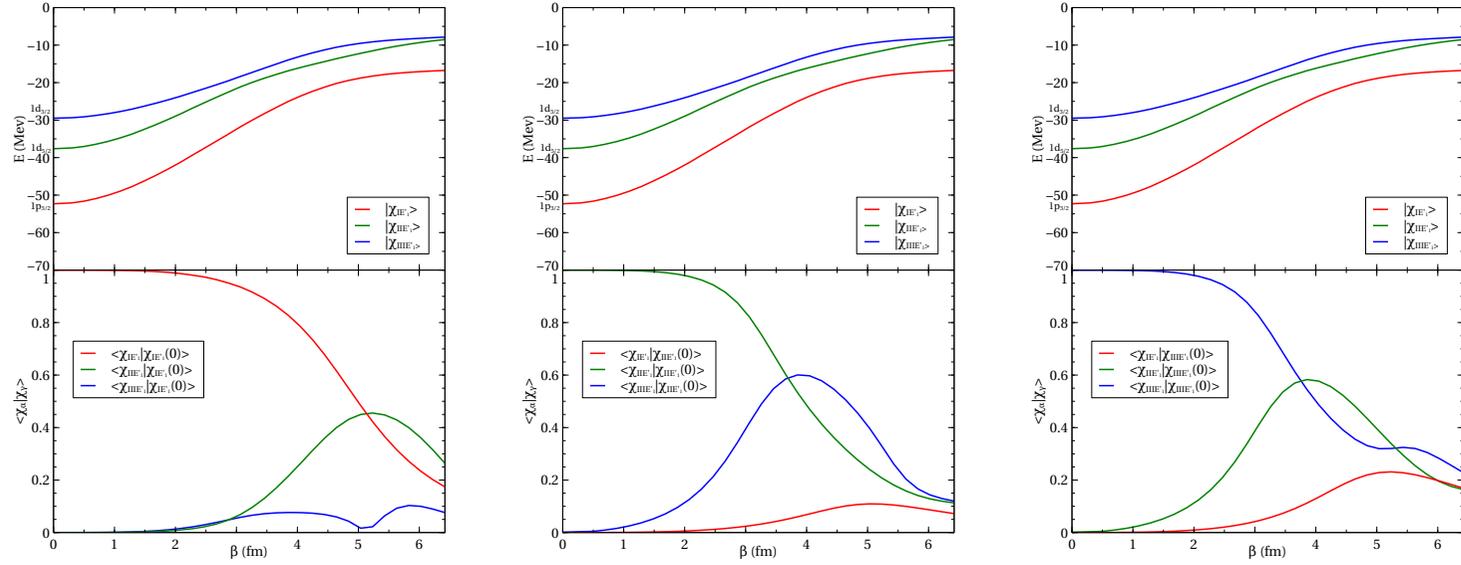
calculemos, sin embargo como contamos con una variabilidad numérica intrínseca del cálculo numérico, que se encuentra entre  $10^{-14} - 10^{-16}$ , lo que encontraremos es que el traslape va a devolver valores aleatorios cercanos a este rango. De esta forma al calcular el traslape entre todos los estados podemos separar estados de tipos de simetría diferentes que por ende pertenecerán a representaciones diferentes. Ejemplos de tales resultados de traslape entre tipos diferentes de estados se encuentran en la figura 3.7, donde se muestra como para todo  $\beta$  no se mezclan entre sí. De esta forma podemos corroborar en primera instancia que para el caso de tres cuerpos la resolución es en dos tipos de dobletes como se mencionó en el apartado 3.1.2. Para identificar que estados corresponden a que representación hacemos uso de la tabla 3.4 para la simetría del triángulo, donde conociendo que para el estado base y todos los estados con  $j = 1/2$  solo se desdobla en un solo estado de la representación  $E'_2$ . De esta forma todos los estados que no devuelvan traslapes con esos estados con  $j = 1/2$  como los mostrados en la figura 3.7 serán de tipo  $E'_2$  y los que sí serán de tipo  $E'_1$ . No es necesario hacer esto para el dumbbell debido a que la propia simetría separa desde un principio los estados de simetría diferentes.

Al igual que en el caso del dumbbell, fue mencionado anteriormente que es posible dividir en bloques la matriz del hamiltoniano como se resume en la tabla 2.1. En el triángulo se dividen en dos grupos de bloques, donde uno de los estados degenerados de un mismo tipo de doblete se encontraron en solo uno de los bloques, no pudiendo estar ambos en el mismo. De esta forma en un bloque encontraremos ambos tipos estados de simetría diferente pero no apreciaremos la degeneración existente por lo que para ello se necesitan ambos bloques matriciales.



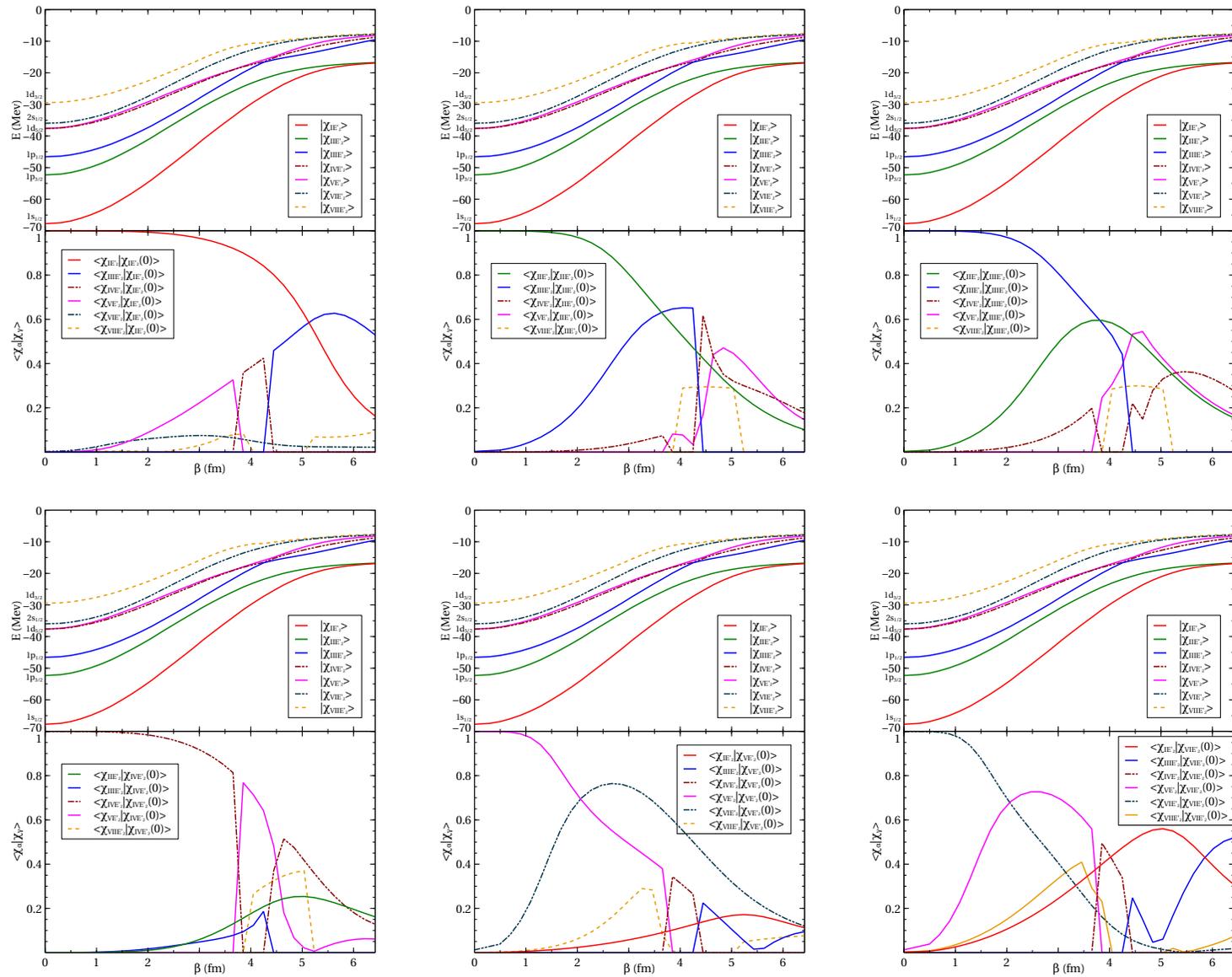
**Figura 3.8:** Se muestra el diagrama de correlación obtenido de resolver la ecuación (2.17) para el caso de tres cuerpos. Se etiquetaron los estados haciendo uso de los traslapes entre estados y la tabla 3.4. Para el cálculo de los niveles de energía se usó  $V_0 = 32$  MeV,  $V_{0,so} = 17$  MeV fm<sup>2</sup> y  $\alpha = 0,0511$  fm<sup>-2</sup>.

En la figura 3.8 se muestra el diagrama de correlación donde están ya identificados los estados con su representación y son etiquetados a partir de esta. En el caso del triángulo se nota evidente la alta densidad de estados de igual simetría muy por encima del caso de dos cuerpos. La interacción entre estados en este caso es bastante compleja que se puede inducir del diagrama de correlación de la figura 3.8, sin embargo no es suficiente información.



**Figura 3.9:** Se muestran las mezclas entre los tres primeros estados pertenecientes a la representación  $E'_1$ . Encima las curvas del diagrama de correlación correspondientes a los estados mostrados en las mezclas. Los estados de referencia tomados, en orden de izquierda a derecha, son primero  $|\chi_{IE'_1}(\beta' = 0)\rangle$ , segundo  $|\chi_{IIE'_1}(\beta' = 0)\rangle$  y tercero  $|\chi_{IIIE'_1}(\beta' = 0)\rangle$ .

Para ello es necesario hacer uso de los traslapes, donde como en el apartado 3.2.1 tomaremos como ejemplo los estados desdoblados provenientes de las capas esféricas hasta  $1d_{3/2}$ . En la figura 3.9 se muestran los traslapes entre los tres primeros estados pertenecientes a la representación  $E'_1$ . Para este grupo como se puede apreciar los cambios son suaves. Las explicaciones obtenidas en el apartado 3.2.1 pueden ser usadas acá de igual manera. De esta forma se confirma los mismos resultados: la distancia energética y la densidad de estados son factores importantes, ambas influyentes en el cambio de los estados y muy dependientes de la deformación del potencial.



**Figura 3.10:** Se muestran las mezclas entre los siete primeros estados pertenecientes a la representación  $E'_2$ . Encima las curvas del diagrama de correlación correspondientes a los estados mostrados en las mezclas. Los estados de referencia tomados en la primera fila, en orden de izquierda a derecha, son primero  $|\chi_{IE'_2}(\beta' = 0)\rangle$ , segundo  $|\chi_{IIE'_2}(\beta' = 0)\rangle$  y tercero  $|\chi_{IIIE'_2}(\beta' = 0)\rangle$ . En la segunda fila  $|\chi_{IIVE'_2}(\beta' = 0)\rangle$ ,  $|\chi_{VIE'_2}(\beta' = 0)\rangle$  y  $|\chi_{VIIIE'_2}(\beta' = 0)\rangle$ .

En la figura 3.10 se muestran las mezclas del grupo pertenecientes a la representación  $E'_2$ . Se puede apreciar facilmente que en este tipo de doblete la mezcla es mayor que para los dobletes de  $E'_1$  y los del caso de dos cuerpos, que se debe principalmente a la mayor densidad de estados que provoca a su vez una distancia energética entre estados menor. Además existen cambios bruscos que muestran una interacción de diferente índole a las de los dobletes de  $E'_1$  y el caso de dos cuerpos. En la región entre 3.5 fm a 5 fm es donde ocurren los cambios bruscos. Estos cambios pueden significar que en esta región existe una fuerte repulsión entre los estados a tal punto que existe un cruce de funciones de onda, o sea, que dos estados intercambien las funciones de onda entre sí. Esto solo ocurre cuando estos estados de igual simetría se acercan hasta un punto en el que la repulsión es tal que provoca este efecto. De estudiar las figuras 3.9 y 3.10 apreciamos que mientras  $\beta$  aumenta ocurre que los estados se acercan mas, empezando por el estado base que desde abajo «empuja» al resto de los estados. Esto provoca un efecto domino que conlleva a que las distancias energéticas entre los estados de misma simetría sea menor, y por ende aumenta la mezcla y la repulsión. Al igual que en el caso de dumbbell, existe una región de cambio de fase y una donde ya no podemos seguir afirmando que existe un único objeto (el núcleo) si no mas bien varios fragmentos (partículas alfa). Para identificar estas regiones nos hacen falta las figuras 3.8 a 3.10 siguiendo lo explicado en el apartado 3.2.1, donde a diferencia del caso de dos cuerpos se va a encontrar que en la región de partículas alfas separadas va a corresponder a tres fragmentos, sin embargo al comparar los diagramas de correlación de las figuras 3.2 y 3.8 las energías a las que los estados tienden van a ser similares. Para el caso del triángulo el cambio de fase ocurre entre 3 y 5.5 fm y la región de partículas alfas separadas es a partir de 6 fm.

Regresemos a la región donde ocurren los cambios bruscos en la zona entre 3.5 fm y 4.5 fm. Como se mencionó anteriormente pudiera ser que se deba al intercambio de funciones de onda de misma simetría, un efecto bien conocido en la mecánica cuántica. Esto se puede explicar debido a que la densidad de estados es mucho mayor (el doble) que el grupo  $E'_1$  y aún mas en comparación con los grupos del dumbbell. Incluso esto se ve en el mismo rango energético, lo que provoca a su vez menor separación energética. Justo donde ocurren esos cambios, las distancias se tornan infinitesimales. Si al variar  $\beta$ , se tomara pasos mas pequeños, las graficas de mezcla serían curvas mas continuas y no contendrían espacios, como entre las curvas  $\langle \chi_{IVE'_2}(\beta) | \chi_{IVE'_2}(\beta' = 0) \rangle$  y  $\langle \chi_{VE'_2}(\beta) | \chi_{IVE'_2}(\beta' = 0) \rangle$ .

Para corroborar la idea de intercambio de funciones de onda, se necesita verificar las regiones donde las curvas presentan valores cercanos a cero. En esas zonas si los estados son de la misma representación entonces al graficar de forma que se puedan apreciar esas curvas en esas regiones deben de verse mezclas, aunque sean muy pequeñas en comparación con las otras curvas. Además también hace falta realizar esto para las mezclas faltantes como  $\langle \chi_{IIE'_2}(\beta) | \chi_{IE'_2}(\beta' = 0) \rangle$ , que como se ve en la figura 3.10 no está graficada. Eso es

debido que al graficar las curvas estas presentan valores mucho menores que los mostrados en la figura 3.10.

Sin embargo al hacer lo dicho anteriormente, en vez de ver un comportamiento de mezcla entre los estados lo que vemos es una imagen similar a figura 3.7. O sea, en estas zonas los estados no se mezclan, como por ejemplo  $\langle \chi_{VE'_2}(\beta) | \chi_{IV'E'_2}(\beta' = 0) \rangle$  y  $\langle \chi_{IIE'_2}(\beta) | \chi_{IE'_2}(\beta' = 0) \rangle$ . Esto conlleva a la conclusión que los estados de  $E'_2$  se separan en dos grupos que de tipos de simetría diferentes. ¡Esto implica que los estados que pensabamos conformaban el grupo de  $E'_2$  en realidad son dos grupos separados que pertenecen a representaciones diferentes! Este hecho es muy sorprendente ya que quiere decir que existe una simetría subyacente que no ha sido identificada. Para corroborar esto usamos como base los estados de tipo  $E'_1$  y los otros dos que denominaremos  $E'_{2p}$  y  $E'_{2s}$ , donde se usó esta nomenclatura pues son dos grupos que se mezclan con los estados provenientes de  $s_{1/2}$  y  $p_{1/2}$  respectivamente. Al usarlos como nueva base si nos devuelven los mismos resultados que el cálculo original quiere decir que efectivamente existen tres tipos de estados de simetría diferente en la solución numérica. Al realizar esto se corroboró la conclusión que sí están separados en tres tipos de estados, obteniéndose los mismos resultados que el cálculo original. Al estudiar más a fondo hasta el punto en que vimos resultados de factores de la ecuación (2.17) por separado, identificamos que el factor causante de separar los estados  $E'_2$  en  $E'_{2p}$  y  $E'_{2s}$  es  $\sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \langle 1/2, l, j, m | Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) | 1/2, l', j', m' \rangle$  presentes en todos los términos de la ecuación (2.17) y mostrados en las ecuaciones (2.20) y (2.22).

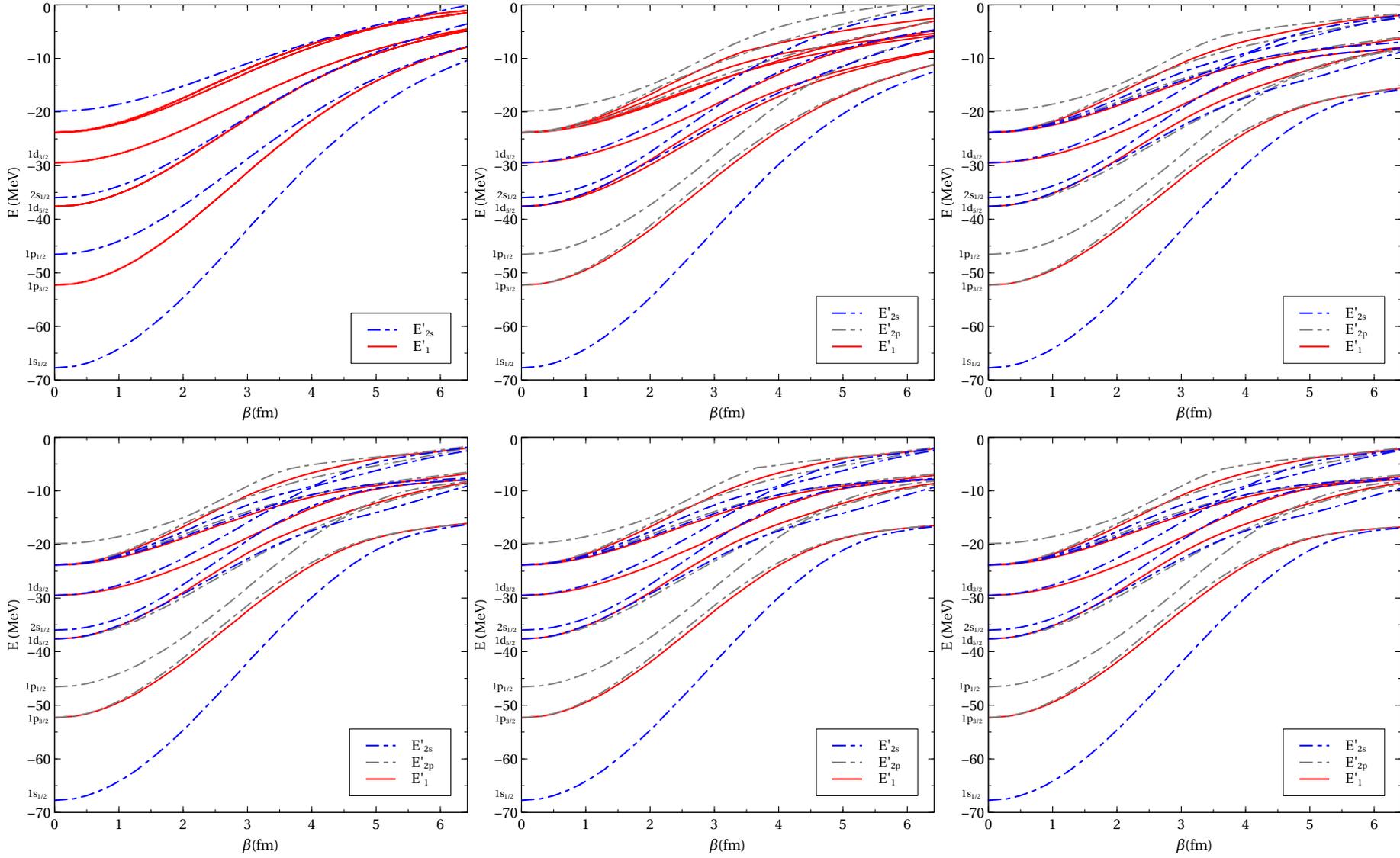
Hasta ahora en el marco de esta tesis no se ha encontrado respuesta para este suceso. En la tabla 3.10 se encuentra la resolución numérica y puede apreciarse que lo que originalmente era supuestamente un solo grupo  $E'_2$ , numéricamente se divide en  $E'_{2s}$  y  $E'_{2p}$ .

**Tabla 3.10:** Resolución encontrada numéricamente en comparación con aquella en la tabla 3.4.

	Resolución de la tabla 3.4	Resolución numérica
$s_{1/2}$	$E'_2$	$E'_{2s}$
$p_{1/2}$	$E'_2$	$E'_{2p}$
$p_{3/2}$	$E'_1 + E'_2$	$E'_1 + E'_{2p}$
$d_{3/2}$	$E'_1 + E'_2$	$E'_1 + E'_{2s}$
$d_{5/2}$	$E'_1 + 2E'_2$	$E'_1 + E'_{2s} + E'_{2p}$
$f_{5/2}$	$E'_1 + 2E'_2$	$E'_1 + E'_{2s} + E'_{2p}$
$f_{7/2}$	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_2$	$E'_1 + 2E'_{2s} + E'_{2p}$
$g_{7/2}$	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_2$	$E'_1 + E'_{2s} + 2E'_{2p}$
$g_{9/2}$	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_1 + E'_2$	$2E'_1 + E'_{2s} + 2E'_{2p}$
$h_{9/2}$	$(E'_1 + 2E'_2) + E'_1 + E'_2$	$2E'_1 + 2E'_{2s} + E'_{2p}$

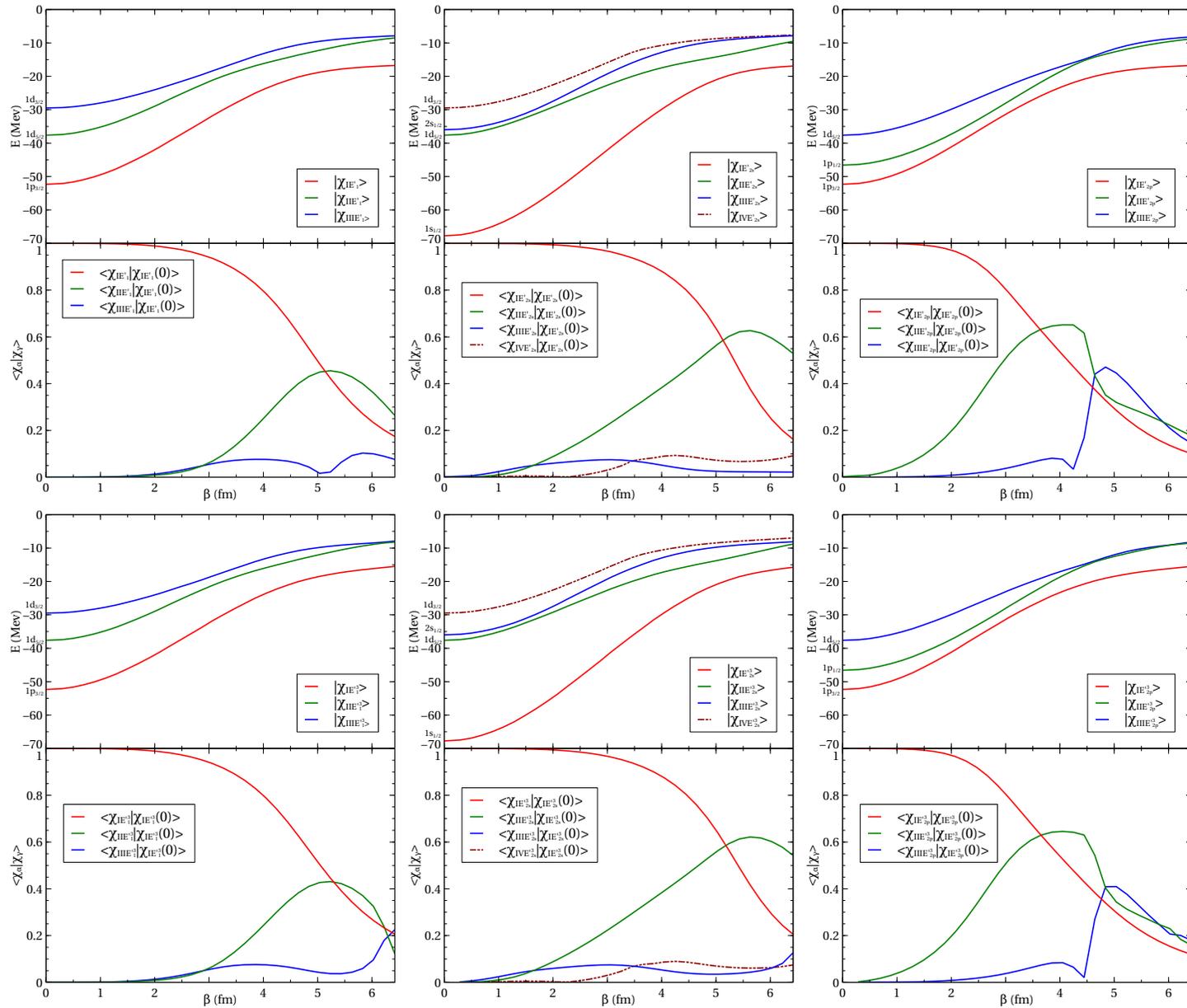
Otro análisis que se le realizó fue encontrar los multipolos principales, sobre todo en la zona de  $\beta = 2$  a 3 fm. En las figuras 3.11 y 3.12 se muestran los resultados de considerar en los cálculos hasta un multipolo,  $\lambda_{max}$ . En estas gráficas ya está tomado en cuenta el hecho de que los estados pertenecientes a la representación  $E'_2$  se dividen en dos,  $E'_{2p}$  y  $E'_{2s}$ , mostrando la resolución de la tabla 3.10.

Usando las figuras 3.11 y 3.12 se puede determinar que tipo de interacciones son las principales, elemento esencial para construir el ACFM, donde además la figura 3.12 muestra en la fila superior los traslapes finales después de separar los estados  $E'_2$  en,  $E'_{2p}$  y  $E'_{2s}$  para los estados de más baja energía como referencia. Se puede notar que en comparación con la figura 3.10 los resultados son más limpios y sin cambios bruscos. En la figura 3.11 se muestra, ordenado de izquierda a derecha empezando desde las gráficas superiores, los resultados de considerar a  $\lambda_{max}$  como 0, 2, 3 y finalmente el cálculo sin corte superior en los multipolos. Se puede apreciar que en los casos de  $\lambda_{max} = 0$  y 2 que la resolución es bastante diferente a la del cálculo completo. Esto no se debe a que la simetría dependa de los multipolos. Este comportamiento es debido al método que usamos para etiquetar los estados, las mezclas. Estas sí dependen de los multipolos fuertemente. Por tanto esto es una evidencia directa de que aunque con  $\lambda_{max} = 0$  o hasta el segundo multipolo se tiene una aproximación hasta segundo orden decimal, las funciones de onda no contienen el comportamiento correcto. Las funciones de onda y las mezclas son más sensibles con respecto a que multipolos son los principales y nos permite ser más fino y contundente a la hora de realizar esta afirmación. Además para el ACFM es necesario hacer cálculos de transiciones, las cuales se realizan usando las funciones de onda de los estados. En la figura 3.11 se aprecia claramente que tomando a  $\lambda_{max}$  como 3 es suficiente para tanto el valor de energía como para que las mezclas muestren la resolución correcta principalmente en la zona de  $\beta = 2$  a 3 fm. Para  $\beta = 6$  y mayores es necesario incluir los multipolos superiores pero con  $\lambda_{max} = 5$  es suficiente.



**Figura 3.11:** Diagramas de correlación con diferentes cotas superiores sobre la suma sobre los multipolos,  $\lambda_{max}$ , de la ecuación (2.17). De izquierda a derecha empezando por la fila superior, los diagramas muestran los resultados al tomar  $\lambda_{max}$  como 0, 2, 3, 4, 5 y el cálculo completo. Para el cálculo completo se muestra la resolución de la tabla 3.10.

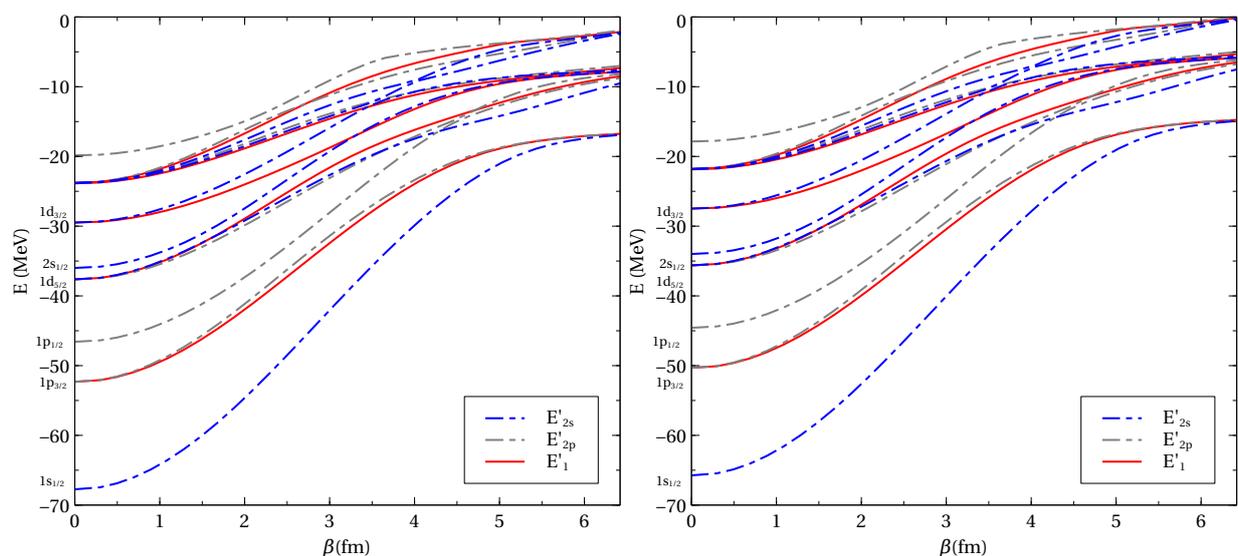




**Figura 3.12:** Se comparan las mezclas entre el cálculo completo (fila superior) y al tomar  $\lambda \leq 3$  (fila inferior). Los estados de referencia  $| \chi_{IE'_1}(\beta' = 0) \rangle$ ,  $| \chi_{IE'_{2s}}(\beta' = 0) \rangle$  y  $| \chi_{IE'_{2p}}(\beta' = 0) \rangle$ . Encima las curvas del diagrama de correlación correspondientes a los estados mostrados en las mezclas.

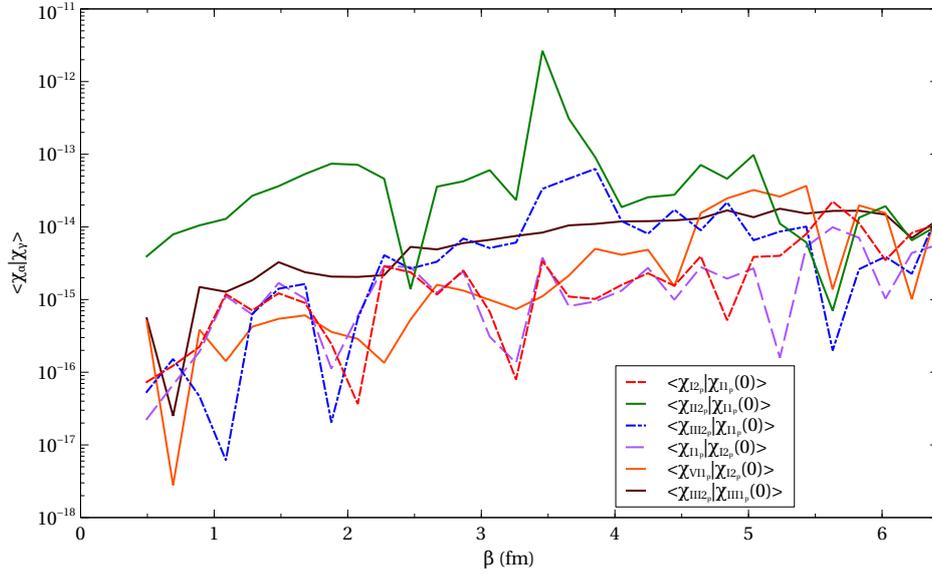


La figura 3.12 nos sirve como confirmación final, como evidencia contundente de la afirmación anterior de que con  $\lambda_{max} = 3$  es suficiente. Las gráficas de la fila superior corresponden al cálculo completo mientras que las de la fila inferior corresponden a  $\lambda_{max} = 3$ . Se muestran las mezclas del primer estado de cada uno de las representaciones,  $E'_1$ ,  $E'_{2s}$  y  $E'_{2p}$  en ambos casos. Como se puede apreciar son idénticas excepto para  $\beta > 5$  fm. Por último, la figura 3.13 muestra la comparación entre protones y neutrones para el caso de tres cuerpos. Al igual que en el caso de dos cuerpos, el comportamiento es el mismo, solo existiendo un desplazamiento vertical para las energías en el caso del protón.



**Figura 3.13:** Comparación entre los resultados obtenidos de la ecuación 2.17 para neutrones (izquierda) y para protones (derecha).

### 3.2.3. Caso tetraedro



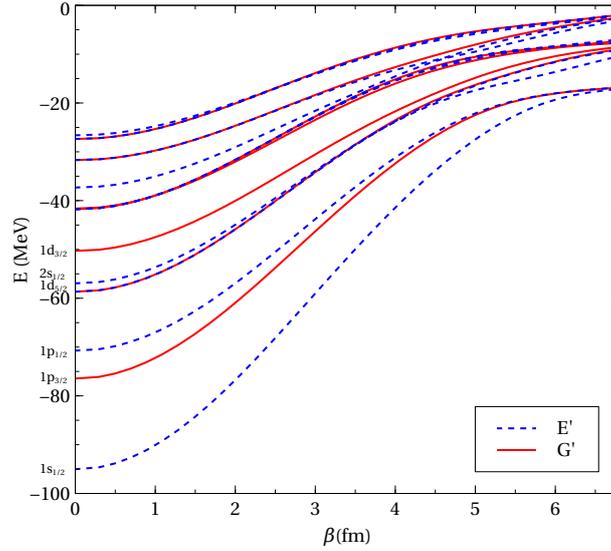
**Figura 3.14:** Valor de mezclas entre estados de simetría diferentes para el caso de cuatro cúmulos. Con este resultado se pueden separar los estados pertenecientes a representaciones diferentes del mismo grupo de simetría. En la leyenda se muestra que los estados pertenecen a dos representaciones diferentes, pero no se ha hecho todavía la identificación de estos con la resolución de la tabla 3.4.

Por último tenemos el caso del tetrahedro en el cual  $k = 4$ . Para esta configuración la simetría es  $T'$ , explicado en la sección 3.1. Al igual que en el caso de tres cuerpos no se conservan ni el momento angular ni la paridad e igualmente la resolución es obtenida en el apartado 3.1.2. La tabla 3.4 muestra que para el caso del tetrahedro un nivel  $(l^{1/2})j$  se desdobra en un tipo de dobletes,  $E'$ , y un tipo de cuadrupletes,  $G'$ . Nuevamente para verificar numéricamente esta resolución se hizo uso de los traslapes entre estados al igual que se realizó en el apartado 3.2.2 usando el mismo criterio. Los traslapes calculados que devuelvan valores en la región de variación numérica nos dicen los estados que no se mezclan entre sí y por ende pertenecen a tipos de estados de simetría diferente. En la figura 3.14 se muestra ejemplos de calcular los traslapes entre tipos diferentes de estados donde se evidencia que este comportamiento se rige para todo  $\beta$ . En primera instancia de nuevo corroboramos que para el caso de cuatro cuerpos la resolución es en dos tipos de estados, un tipo de doblete y un tipo de cuadruplete, como se encontró en el apartado 3.1.2.

Otra vez se usó la tabla 3.4 para identificar que estados corresponden a que representación e igualmente que en el apartado 3.2.2 se usaron los estados con  $j = 1/2$  que solo se desdobra en sólo estados pertenecientes a la representación  $E'$ . De esta forma todos los estados que no devuelvan traslapes con esos estados con  $j = 1/2$  como los mostrados en la figura 3.14 serán de tipo  $E'$  y los que sí serán de tipo  $G'$ . Sin embargo a diferencia del triángulo aparte de las mezclas, podemos usar la degeneración para separar los dos grupos, el doblete y el cuadruplete. Por eso separar los grupos de estados, pertenecientes a representaciones diferentes, en el tetraedro es mas simple que para el triángulo.

Al igual que para los casos de 3 cuerpos y 2 cuerpos, es posible dividir en bloques la matriz del hamiltoniano como se resume en tabla 2.1. En el tetraedro se dividen en tres grupos de bloques, donde los estados degenerados del doblete de tipo  $E'$  se encontraron en dos de los bloques de los tres posibles, sin que se encuentren ambos en el mismo y sin aparecer en uno de los tres. Por otra parte los estados degenerados del cuadruplete de tipo  $G'$  se presentó un solo estado en cada uno de los bloques donde aparece un estado de simetría  $E'$  y los dos restantes aparecieron en el bloque donde no hay estados de simetría  $E'$ . En resumen tenemos dos bloques donde encontraremos todos los tipos estados y uno donde solo encontraremos los del cuadruplete por lo que la degeneración solo se obtiene al tomar en cuenta los tres bloques.

En la figura 3.15 se muestra el diagrama de correlación etiquetados con su respectiva representación. El caso de 4 cuerpos es un caso cuyos resultados encontrados se encuentran en el intermedio entre los resultados del de dos cuerpos y del de tres. No tiene tanta densidad como el triángulo pero es mayor que el dumbbell y la interacción es mas compleja que el caso de 2 cuerpos mientras es inferior al de 3 cuerpos. Todo esto se puede ver muy facilmente comparando las figuras 3.2, 3.15 y 3.15 entre sí pero igual necesitamos estudiar los traslapes para corroborar lo mencionado.

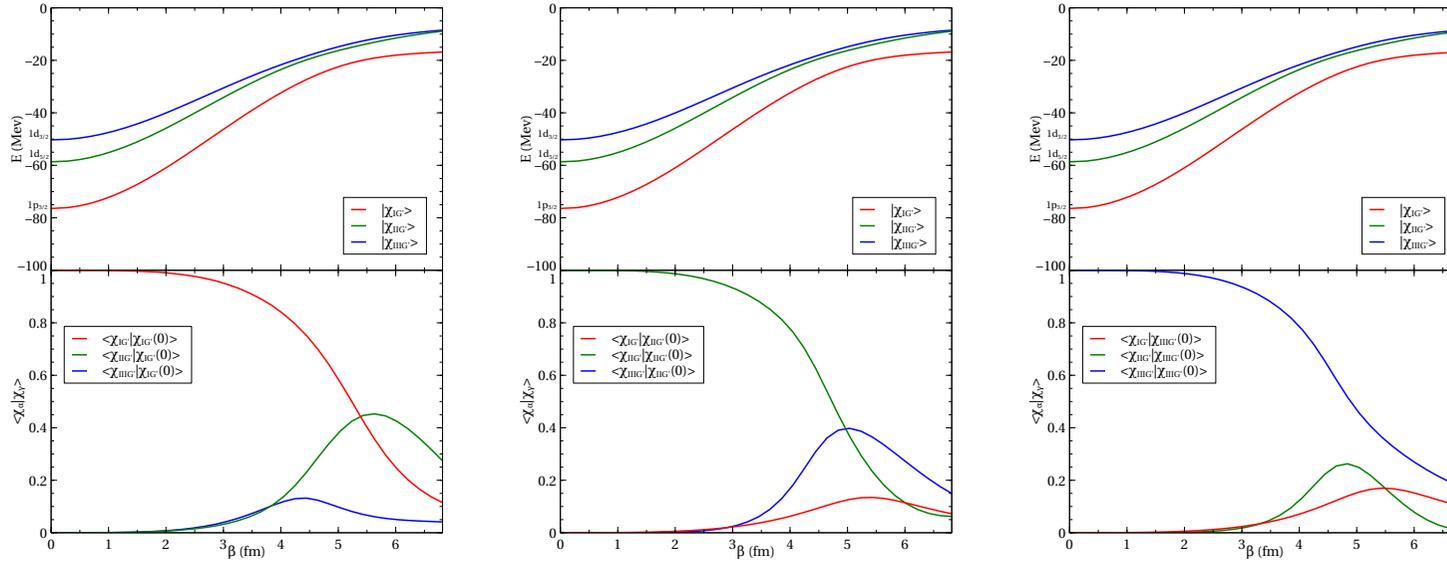


**Figura 3.15:** Se muestra el diagrama de correlación obtenido de resolver la ecuación (2.17) para el caso de cuatro cuerpos. Se etiquetaron los estados haciendo uso de los traslapes entre estados y la tabla 3.4. Para el cálculo de los niveles de energía se usó  $V_0 = 32$  MeV,  $V_{0,so} = 12,1$  MeV fm<sup>2</sup> y  $\alpha = 0,0511$  fm<sup>-2</sup>.

Mostraremos nuevamente los estados desdoblados provenientes de las capas esféricas hasta  $1d_{3/2}$ . En la figura 3.16 tenemos los traslapes entre los tres primeros estados del grupo pertenecientes a la representación  $G'$ . Al igual que para la representación  $E'_1$  y los dobletes del caso de dos cuerpos se puede apreciar que no existe cambios bruscos. Igualmente para explicar figura 3.16 se hace uso de los argumentos usados para el dumbbell. Otra confirmación de los resultados que la distancia energética y la densidad de estados son factores importantes y muy dependientes de la deformación del potencial.

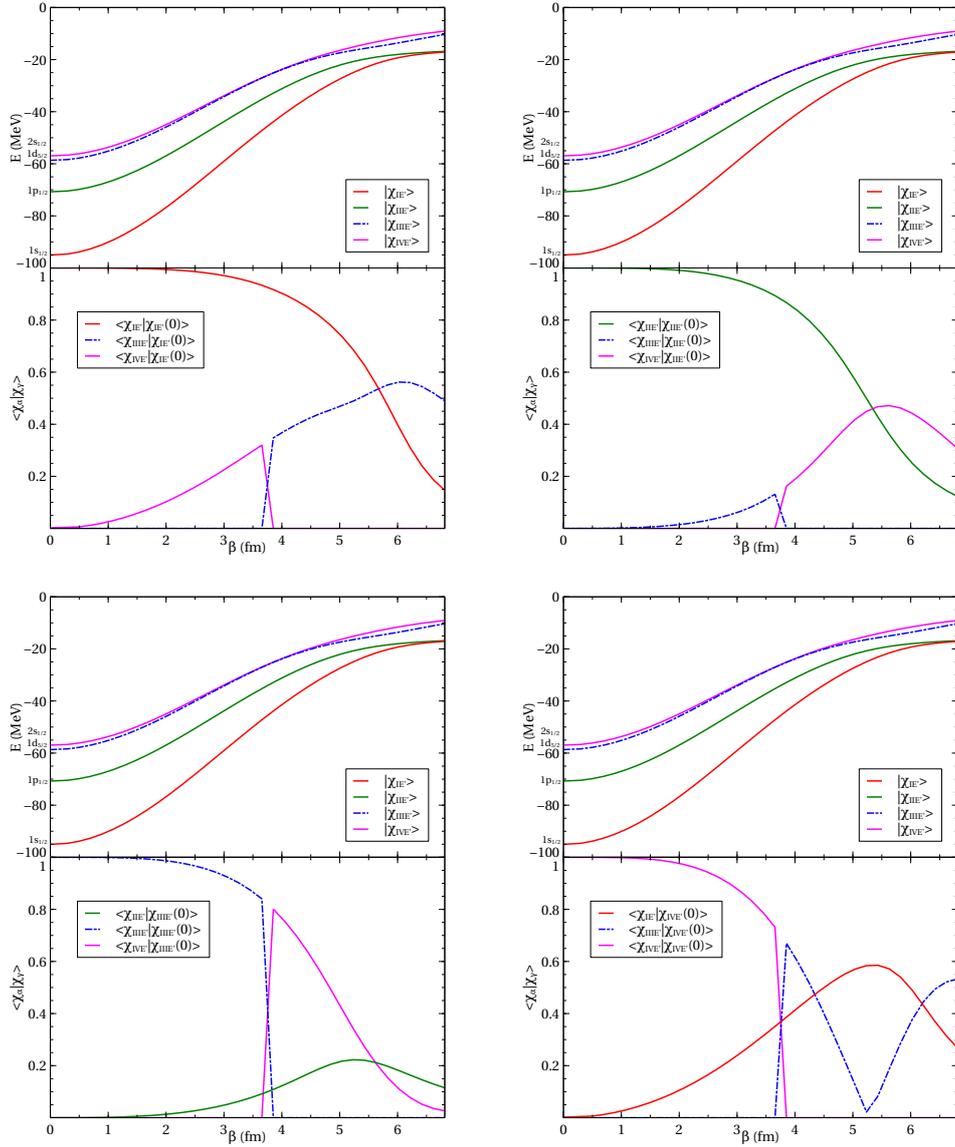
En la figura 3.17 se muestran las mezclas del grupo pertenecientes a la representación  $E'$ . Aquí podemos apreciar los cambios bruscos en la zona entre 3.5 fm y 4 fm. Esta región como en el caso de tres cuerpos es un foco importante que si no tuvieramos en cuenta lo obtenido en el caso de tres cuerpos pensaríamos que solo corresponde a una fuerte repulsión entre los estados por las mismas razones dadas en el apartado 3.2.2. Al estudiar las figuras 3.16 y 3.17 apreciamos que en el caso del tetraedro al aumentar  $\beta$  aumenta la mezcla, provocando un efecto domino, como en el caso de tres cuerpos, que hace que las distancias energéticas entre los estados de misma simetría sea menor y por ende aumenta la mezcla y repulsión. Otra vez se presenta una región de cambio de fase y una donde ya no podemos seguir afirmando que existe un único objeto (el núcleo) si no más bien cuatro

fragmentos (partículas alfa). Para identificar estas regiones nos hacen falta las figuras 3.15 a 3.17 siguiendo lo explicado en el apartado 3.2.1. Para el caso del tetraedro el cambio de fase ocurre entre 3.5 a 5 fm y se consideran fragmentos separados a partir de 6 fm y las energías a las que convergen los niveles de energía son similares a las encontradas en el caso de tres y dos cuerpos.



**Figura 3.16:** Se muestran las mezclas entre los tres primeros estados pertenecientes a la representación  $G'$ . Encima las curvas del diagrama de correlación correspondientes a los estados mostrados en las mezclas. Los estados de referencia tomados, en orden de izquierda a derecha, son primero  $|\chi_{IG'}(\beta' = 0)\rangle$ , segundo  $|\chi_{IIG'}(\beta' = 0)\rangle$  y tercero  $|\chi_{IIIG'}(\beta' = 0)\rangle$ .





**Figura 3.17:** Se muestran las mezclas entre los cuatro primeros estados pertenecientes a la representación  $E'$ . Encima las curvas del diagrama de correlación correspondientes a los estados mostrados en las mezclas. Los estados de referencia tomados en la primera fila, en orden de izquierda a derecha, son primero  $|\chi_{IE'}(\beta' = 0)\rangle$ , segundo  $|\chi_{IIE'}(\beta' = 0)\rangle$ . En la segunda fila  $|\chi_{IIIE'}(\beta' = 0)\rangle$  y  $|\chi_{IIVE'_1}(\beta' = 0)\rangle$ .

Los traslapes que presentan cambios bruscos en la región entre 3.5 fm y 4 fm se realizó el mismo análisis que en el caso de tres cuerpos. En el caso del tetraedro los traslapes a estudiar serían  $\langle \chi_{IIIE'}(\beta) | \chi_{IE'}(\beta' = 0) \rangle$  y  $\langle \chi_{IIIE'}(\beta) | \chi_{IIIE'}(\beta' = 0) \rangle$ , donde si los pasos en  $\beta$  fuesen infinitesimales no presentarían espacios, y  $\langle \chi_{IIIE'}(\beta) | \chi_{IE'}(\beta' = 0) \rangle$  que no aparecen. El resultado es que obtenemos que los estados que supuestamente deben de ser todos de tipo  $E'$  se dividen en dos:  $E'_s$  y  $E'_p$  donde hemos usado la misma denominación que en el caso del triángulo por la misma razón, son dos grupos que se mezclan con los estados provenientes de  $s_{1/2}$  y  $p_{1/2}$  respectivamente. La forma de corroborar este resultado es haciendo uso de los tres tipos de estados,  $E'_s$ ,  $E'_p$  y  $G'$ , como nueva base para los cálculos y si devuelven los mismos resultados que el cálculo original entonces corrobora que cada uno pertenece a una representación diferente. Los resultados de realizar esto corroboró que justo como se encontró existen tres tipos de estados de diferente simetría. Se encuentra además que  $\sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i) \langle 1/2, l, j, m | Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) | 1/2, l', j', m' \rangle$  presentes en todos los términos de la ecuación (2.17) y mostrados en las ecuaciones (2.20) y (2.22) son los causante de este efecto. Estos resultados obtenidos en tanto el caso de tres y cuatro cuerpos no se encontrado respuesta en el marco de esta tesis y concluimos que esta simetría subyacente no identificada no es particular de una configuración geométrica. En la tabla 3.11 se encuentra la resolución numérica y puede apreciarse que lo que originalmente era supuestamente un solo grupo,  $E'$ , numéricamente se divide en  $E'_s$  y  $E'_p$ .

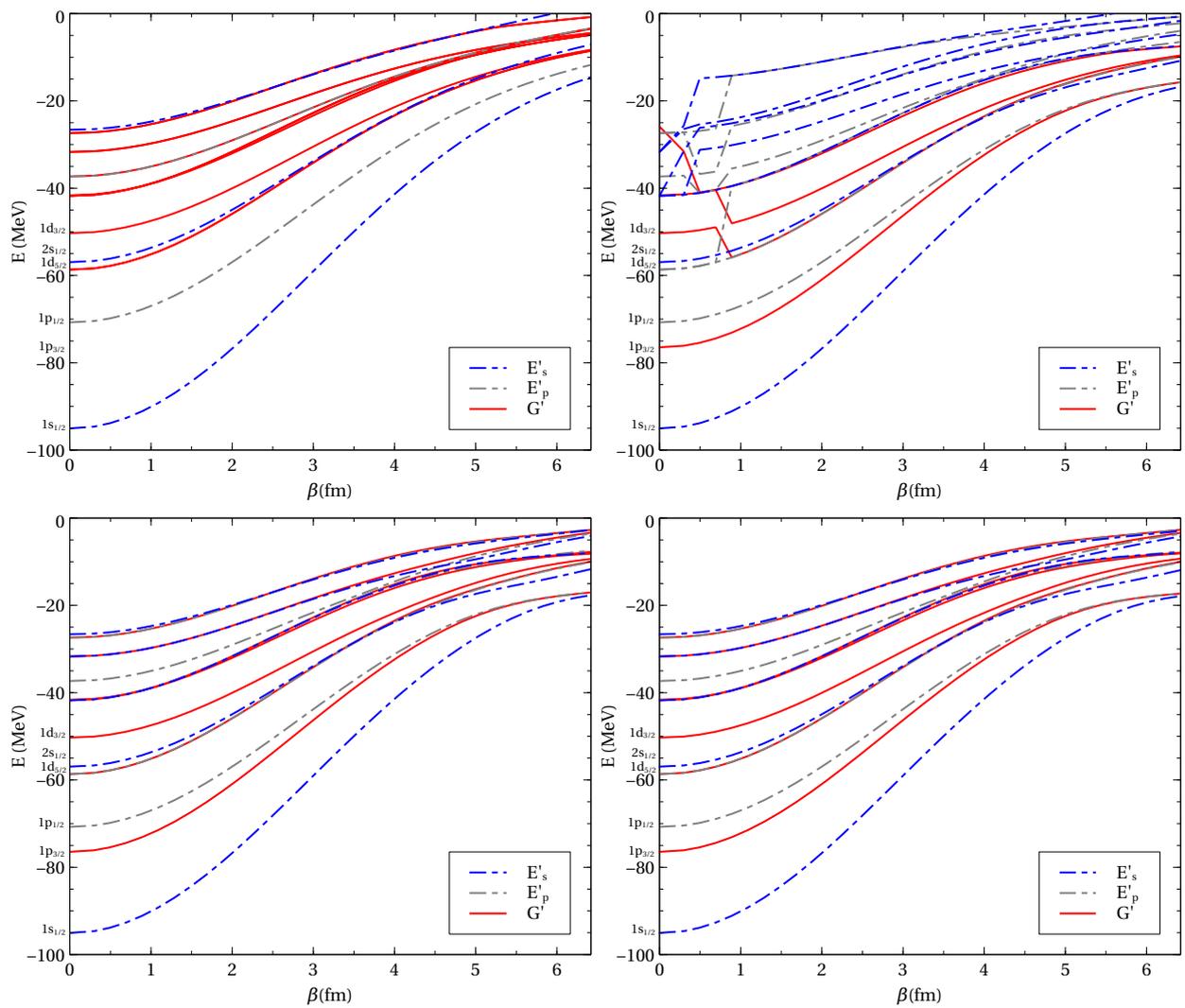
**Tabla 3.11:** Resolución encontrada numéricamente en comparación con aquella en la tabla 3.4.

	Resolución de la tabla 3.4	Resolución numérica
$s_{1/2}$	$E'$	$E'_s$
$p_{1/2}$	$E'$	$E'_p$
$p_{3/2}$	$G'$	$G'$
$d_{3/2}$	$G'$	$G'$
$d_{5/2}$	$E' + G'$	$E'_p + G'$
$f_{5/2}$	$E' + G'$	$E'_s + G'$
$f_{7/2}$	$(E' + G') + E'$	$E'_s + E'_p + G'$
$g_{7/2}$	$(E' + G') + E'$	$E'_s + E'_p + G'$
$g_{9/2}$	$(E' + G') + G'$	$E'_s + 2G'$
$h_{9/2}$	$(E' + G') + G'$	$E'_p + 2G'$

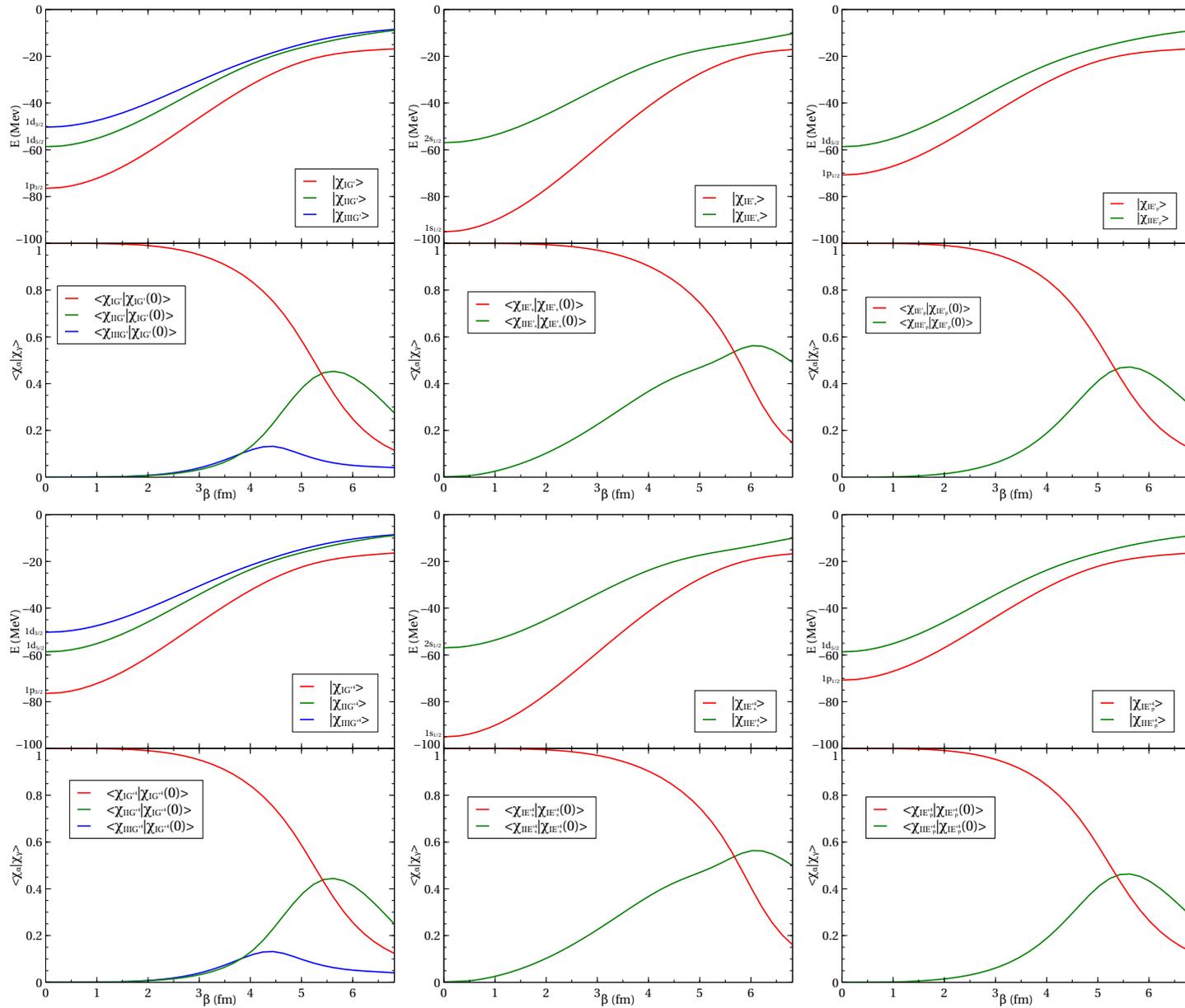
Igualmente se encontraron los multipolos principales, sobre todo en la zona de  $\beta = 2$  a 3 fm. En las figuras 3.18 y 3.19 se muestran los resultados de considerar en los cálculos

hasta un multipolo,  $\lambda_{max}$ . En estas gráficas ya está tomado en cuenta la resolución de la tabla 3.10.

En la figura 3.18 se muestra, ordenado de izquierda a derecha empezando desde las gráficas superiores, los resultados de considerar a  $\lambda_{max}$  como 0, 3, 4 y finalmente el cálculo sin corte superior en los multipolos. Se puede apreciar que ocurre como en el triangulo comportamientos de las soluciones no esperados. De nuevo esto es debido a que el método que usamos para etiquetar los estados, las mezclas es fuertemente dependiente de los multipolos y sirve como evidencia directa de que es necesario tener en cuenta mas que solo el valor energético de los estados para poder encontrar los multipolos principales, para esto hay que tomar en cuenta las funciones de onda y las mezclas que sirven como medidas mas sensibles. En la figura 3.18 se aprecia claramente que tomando a  $\lambda_{max}$  como 4 es suficiente para tanto el valor de energía como para que las mezclas muestren la resolución correcta principalmente en la zona de  $\beta = 2$  a 3 fm incluso para  $\beta > 6$  a diferencia del caso de 3 cuerpos.

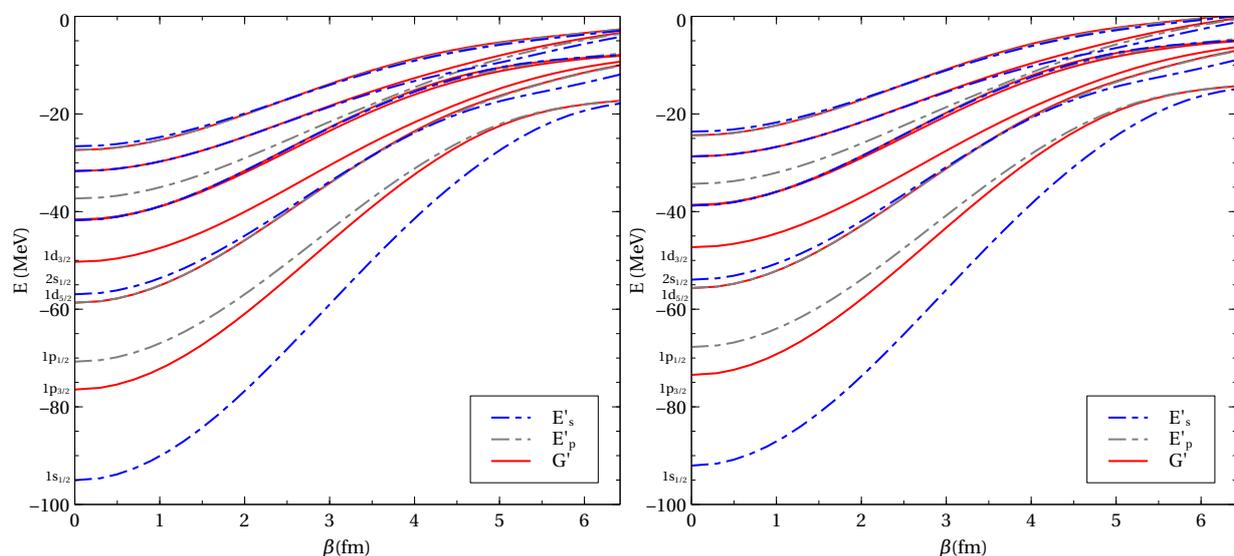


**Figura 3.18:** Diagramas de correlación con diferentes cotas superiores sobre la suma sobre los multipolos,  $\lambda_{max}$ , de la ecuación (2.17). De izquierda a derecha empezando por la fila superior, los diagramas muestran los resultados al tomar  $\lambda_{max}$  como 0, 3, 4 y el cálculo completo. Para el cálculo completo se muestra la resolución de la tabla 3.10.



**Figura 3.19:** Se comparan las mezclas entre el cálculo completo (fila superior) y al tomar  $\lambda_{max} = 4$  (fila inferior). Los estados de referencia son  $|\chi_{IG'}(\beta' = 0)\rangle$ ,  $|\chi_{IE'_s}(\beta' = 0)\rangle$  y  $|\chi_{IE'_p}(\beta' = 0)\rangle$ . Encima se encuentran las curvas del diagrama de correlación correspondientes a los estados mostrados en las mezclas.

La figura 3.19 nos sirve como confirmación final, como evidencia contundente de la afirmación anterior de que con  $\lambda_{max} = 4$  es suficiente. En la figura 3.19, las gráficas de la columna izquierda corresponden al cálculo completo mientras que a la columna derecha corresponden a  $\lambda_{max} = 4$ . Se muestran las mezclas del primer estado de cada uno de las representaciones,  $G'$ ,  $E'_s$  y  $E'_p$  en ambos casos. Como se puede apreciar son idénticas excepto para casi todo  $\beta$ . Solo al final, después de  $\beta = 6$  fm es que hay una ligera diferencia entre las gráficas de la columna izquierda con las de la derecha. Por último, la figura 3.20 muestra la comparación entre protones y neutrones para el caso de cuatro cuerpos. Al igual que en el caso de dos cuerpos, el comportamiento es el mismo, solo existiendo un desplazamiento vertical para las energías en el caso del protón.



**Figura 3.20:** Comparación entre los resultados obtenidos de la ecuación 2.17 para neutrones (izquierda) y para protones (derecha).



# Capítulo 4

## Resumen y conclusiones

En el marco de esta tesis se realizó el desdoblamiento de niveles nucleares, donde se asumió una estructura  $k\alpha + x$  para el núcleo, donde  $k$  es el número de cúmulos,  $\alpha$  es el cúmulo y  $x$  es un nucleón. Realizando un estudio similar al del modelo de Nilsson usamos un potencial deformado, pero ahora de cúmulos nucleares, donde los cúmulos son partículas alfa. Como deformación se tomó a la distancia relativa al centro de masa del sistema nuclear completo. Para ello hemos hecho uso del Modelo de Capas de Cúmulos (CSM por sus siglas en inglés) descrito en la sección 2.1. Se obtuvo el desdoblamiento de los niveles de energía esféricos en función de la deformación para diferentes casos de números de cúmulos,  $k$ , y configuraciones geométricas diferentes. Los casos estudiados fueron para  $k = 2$  la configuración de dumbbell, para  $k = 3$  el triángulo equilátero y para  $k = 4$  el tetraedro. La simetría de cada uno de estos casos se obtiene a través del factor geométrico de la ecuación (2.2),  $\sum_{i=1}^k Y_{\lambda\mu}^*(\theta_i, \phi_i)$ , y fue analizado en los apartados 2.1.1.1 a 2.1.1.3 en detalle.

Los resultados fueron obtenidos de resolver la ecuación (2.17) en la base del oscilador armónico. Haciendo uso de las condiciones del factor geométrico pudimos construir la base de forma tal que en vez de resolver el problema de autofunciones y autovalores para una matriz completa se resolvieron bloques matriciales más pequeños de la matriz completa, ahorrando recursos computacionales y tiempo, mostrados en la tabla 2.1 de la sección 2.2. La convergencia de la solución numérica fue obtenida al tomar  $n = 15$  capas en el cálculo y hasta  $\beta \simeq 6.5$  fm, donde el mínimo alcance de  $\beta$  ocurrió para el caso del triángulo equilátero, donde las mezclas e interacciones son superiores a los otros dos casos. Los tiempos para realizar el cálculo numérico se encuentran en la tabla 4.1. Como se puede apreciar la configuración de mayor costo computacional fue el caso de tres cuerpos y el dumbbell fue el de menos.

El primer resultado obtenido de este estudio es que los protones y neutrones no se diferencian en el comportamiento del desdoblamiento de los niveles de energía esféricos

**Tabla 4.1:** Tiempos realizados por el sistema de cómputo para realizar los cálculos numéricos de la ecuación (2.17)

Casos estudiados	Tiempo del cálculo numérico
Dumbbell	1 hora : 42 min:43 s
Triángulo	1 día : 9 horas : 28 min :16 s
Tetraedro	23 horas : 28 min : 42 s

en el CSM. Solo observamos que existe un desplazamiento vertical de los resultados, debido a la disminución del pozo de potencial por la repulsión coulombiana. Se pudo observar además que la deformación del núcleo se relaciona con diferentes imágenes o estados en los que pudiera estar el núcleo, desde cero deformación ( $\beta = 0$ ) que corresponde a un núcleo esférico, a una región de cambio de fase donde no es correcto hablar de un núcleo pero todavía no corresponden a fragmentos separados ( $\beta$  entre 3.5 y 5.5 fm) y finalmente cuando la deformación es suficientemente grande ( $\beta > 6$  fm) y nos devuelve un esquema y una imagen de degeneración que corresponde a  $k$  veces a una partícula. En el caso del dumbbell sería  $2\alpha$ , el del triángulo serían  $3\alpha$  y el tetraedro  $4\alpha$  donde todos concuerdan en el valor de los autovalores de energía de tales partículas alfa.

El segundo resultado importante proviene de la simetría de las configuraciones del sistema  $k\alpha + x$ . De las simetrías de nuestro problema y del hecho de encontrarnos en el marco de referencia intrínseco del sistema, no todas las configuraciones pudieron ser etiquetados por números cuánticos. El dumbbell es el caso en el que encontramos números cuánticos que sí se pueden usar para etiquetar los estados: la proyección del momento angular total,  $m$ , y la paridad, como está explicado en la apartado 3.2.1. Para los casos del triángulos y el tetraedro se necesitó encontrar la clasificación de los estados según la simetría puntual que corresponde a la configuración geométrica de las partículas alfa, explicado en la sección 3.1. Para estas simetrías puntuales se encontró que en el caso del triángulo iban a existir dos representaciones para clasificar los estados,  $E'_1$  y  $E'_2$ , y para el tetraedro serían  $E'$  y  $G'$ .

Usando los traslapes,  $\langle \chi_\gamma(\beta) | \chi_{\gamma'}(\beta') \rangle$ , en el cálculo numérico se pudo separar en grupos de simetría apartes los estados intrínsecos, obtener una indicación de la mezcla entre niveles y obtener otra medida de convergencia de la solución. Este producto interno se realizó fijando uno de los estados y estudiar como varía el valor de este producto interno mientras se varían los estados y la deformación. Así se encontró que existen estados para los cuales el traslape siempre es cero (dentro del rango de la variación numérica), por lo que de esta forma podemos asegurar que pertenecen a simetrías diferentes. Aquellos por otro lado aquellos cuyos valores no caen dentro del rango de la variación numérica, nos proporcionó información acerca las principales interacciones entre los estados de misma simetría. Los estados tomados como fijo fueron aquellos para cero deformación,  $\beta = 0$  fm, o sea los estados esféricos. Seguidamente usando el resultado de la resolución en representaciones de grupos puntuales y la de los traslapes, se pudo etiquetar los estados

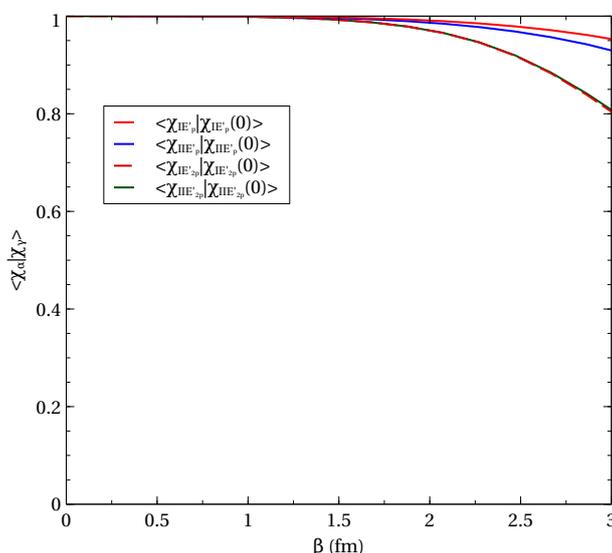
con su representación correspondiente usando los estados pertenecientes a las órbitas con  $j = 1/2$  pues sus resoluciones devuelven una sola representación.

Un tercer resultado, relacionado con el segundo, fue encontrar una simetría extra no esperada en las soluciones. Esto se obtuvo al analizar con profundidad los traslapes en regiones donde estas exhibían comportamientos bruscos. De esta forma se encontró que nuestra resolución encontrada describía bien un desdoblamiento, el de  $E'_1$  y  $E'_2$  en el triángulo y el de  $E'$  y  $G'$  en el tetraedro. Pero se encontró además que los estados de simetría  $E'_2$  del triángulo se dividen en dos grupos con traslape igual a cero, denominados  $E'_{2s}$  y  $E'_{2p}$ . Los estados de simetría  $E'$  del tetraedro igualmente se dividen en dos grupos,  $E'_s$  y  $E'_p$ . La razón por esto fue encontrada ser debido a la combinación entre el factor geométrico y del momento angular. Sin embargo en el marco de esta tesis no se ha podido encontrar una explicación de por qué ocurre esto y que significado tiene.

Por último se encontraron los multipolos principales de esta interacción. Este era uno de las razones principales para realizar este trabajo pues es de vital importancia para la creación del ACFM. En el caso del dumbbell los multipolos principales son  $\lambda = 0, 2$ , para el triángulo son  $\lambda = 0, 2, 3$  y para el tetraedro  $\lambda_{max} = 0, 3, 4$ . En esto nos proporcionó mucha ayuda el usar los traslapes pues con multipolos inferiores era ya suficiente para los autovalores de energías, sin embargo no era suficiente para el comportamiento de los estados intrínsecos y ahí fueron los traslapes los que proporcionaron la indicación correcta de cual era el multipolo correcto. Los estados intrínsecos por su parte son vital para el estudio de transiciones electromagnéticas.

En el ?? se mencionó que los trabajos [14, 15, 16] se estudiaron el  $^{12}\text{C}$  y el  $^{16}\text{O}$ , donde se asumió que estan formados por  $k$  cúmulos alfa en los vértices de un triángulo y un tetraedro respectivamente donde la distancia de las partículas alfa al centro de masa de todo el sistema es de aproximadamente 2 fm. Para comparar nuestros resultados con estudios experimentales podemos asumir que los núcleos vecinos, como  $^{13}\text{C}$  y el  $^{17}\text{O}$ , siguen una estructura de  $k$  cúmulos alfa con una distancia al centro de masa de aproximadamente 2 fm ( $\beta \approx 2$ ) con un nucleón rodeando esta estructura. Entonces en nuestros diagramas de correlación para protones o neutrones de las figuras 3.5, 3.13 y 3.20 observaríamos para  $\beta=2$  fm el esquema de niveles presente, llenaríamos los niveles con nucleones de acuerdo con el principio de Pauli y el nivel en el que se encuentre el nucleón extra nos dirá que paridad y momento angular debe tener el núcleo y comparar esto con resultados experimentales. Para el dumbbell, aunque no tenemos directamente el momento angular total u orbital sí tenemos la proyección y el momento angular total con energía mas baja sería aquel para el cual  $j = m$ . Sin embargo esto no es posible hacer directamente para los casos de tres cuerpos y de cuatro ya que los números cuánticos ahí no se conservan. En este caso es que hacemos uso de los traslapes donde nos sirve el hecho de haber escogido como estados de referencia los esféricos. De esta forma podemos decir de forma aproximada cual es el momento angular mas probable que pueda tener el estado. Para nosotros los traslapes más importantes son aquellos que son de la forma  $\langle \chi_\gamma(\beta) | \chi_\gamma(0) \rangle$  que en la mayor parte de

valores de  $\beta$  son los mayores. En el caso del dumbbell el nivel de energía que contendrían el nucleón extra es el del estado  $|\chi_{1(3/2)^-}(\beta)\rangle$  y el hueco  $|\chi_{1(1/2)^-}(\beta)\rangle$ . Para el triángulo el estado que contendría el nucleón extra sería  $|\chi_{IIE'_p}(\beta)\rangle$  y el hueco  $|\chi_{IE'_p}(\beta)\rangle$  y para el tetraedro serían  $|\chi_{IIE'_p}(\beta)\rangle$  y  $|\chi_{IE'_p}(\beta)\rangle$  respectivamente. Los traslapes de los estados anteriores se encuentran en la figura 4.1. Como se puede apreciar el valor de ellos para  $\beta \approx 2$  fm se encuentran por encima de 0.95. Por lo que se puede asumir que para valores de  $\beta$  cercanos a 2 fm el momento angular total y paridad para esos estados es el mismo que los estados esféricos de donde provienen. Entonces el momento angular total y paridad ( $J^\pi$ ) que asumiremos tiene cada estado sería: el estado  $|\chi_{IE'_p}(\beta)\rangle$  le correspondería  $3/2^-$ , a los estados  $|\chi_{IIE'_p}(\beta)\rangle$  y  $|\chi_{IE'_p}(\beta)\rangle$  sería  $1/2^-$  y a  $|\chi_{IIE'_p}(\beta)\rangle$  sería  $5/2^+$ . En la tabla 4.2 se encuentra un resumen de comparar nuestros valores teóricos propuestos con los valores experimentales, según [23], que como se aprecia coinciden.



**Figura 4.1:** Traslapes  $\langle \chi_{IE'_p}(\beta) | \chi_{IE'_p}(0) \rangle$ ,  $\langle \chi_{IIE'_p}(\beta) | \chi_{IIE'_p}(0) \rangle$ ,  $\langle \chi_{IE'_p}(\beta) | \chi_{IE'_p}(0) \rangle$ ,  $\langle \chi_{IIE'_p}(\beta) | \chi_{IIE'_p}(0) \rangle$ .

Con estos resultados podemos realizar para el futuro estudios en casos físicos reales como estudiar transiciones electromagnéticas en los núcleos  $^9\text{Be}$ ,  $^9\text{B}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{13}\text{N}$ ,  $^{17}\text{O}$  y  $^{17}\text{F}$ . Para el caso del  $^9\text{Be}$  y  $^9\text{B}$  ya existe un trabajo hecho [24] el cual solo habría de añadirle el estudio

**Tabla 4.2:** Comparación entre valores experimentales y valores obtenidos del CSM del momento angular total y paridad del núcleo ( $J^\pi$ )

	<sup>9</sup> Be	<sup>9</sup> B	<sup>11</sup> C	<sup>11</sup> B	<sup>13</sup> C	<sup>13</sup> N	<sup>15</sup> O	<sup>15</sup> N	<sup>17</sup> O	<sup>17</sup> F
Experimento	$3/2^-$	$3/2^-$	$3/2^-$	$3/2^-$	$1/2^-$	$1/2^-$	$1/2^-$	$1/2^-$	$5/2^+$	$5/2^+$
CSM	$3/2^-$	$3/2^-$	$3/2^-$	$3/2^-$	$1/2^-$	$1/2^-$	$1/2^-$	$1/2^-$	$5/2^+$	$5/2^+$

de los traslapes por tanto nuestros esfuerzos se concentrarán principalmente en <sup>13</sup>C, <sup>13</sup>N, <sup>17</sup>O y <sup>17</sup>F. En estos trabajos uno de los objetivos principales es obtener la estructura de bandas rotacionles. Además nos centraremos también en encontrar una explicación para la división de los estados de simetría  $E'_2$  del triángulo en  $E'_{2s}$  y  $E'_{2p}$  y la de los estados de simetría  $E'$  del tetraedro en  $E'_s$  y  $E'_p$ . Conjuntamente empezaremos el desarrollo del ACFM en el sistema de referencia del laboratorio gracias a la información obtenida de los multipolos principales.



# Bibliografía

- [1] M. Freer, *Clustering in Light Nuclei; from the Stable to the Exotic*. No. 879, 2014.
- [2] L. R. Hafstad and E. Teller *Phys. Rev.*, vol. 54, p. 681, (1938).
- [3] H. Morigana *Phys. Rev.*, vol. 101, p. 254, 1956.
- [4] T. Bengtsson, M. E. Faber, G. Leander, P. Moller, M. Ploszajczak, I. Ragnarsson, and S. Aberg *Phys. Scr.*, vol. 24, p. 200, 1981.
- [5] W. D. M. Rae *Int. J. Mod. Phys.*, vol. 3, p. 1343, 1988.
- [6] W. Nazarewicz and J. Dobaczewski *Phys. Rev. Lett.*, vol. 68, p. 154, 1992.
- [7] A. Bohr and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure*, vol. 24. World Scientific, 1998.
- [8] N. Itagaki, S. Aoyama, S. Okabe, and K. Ikeda *Phys. Rev. C*, vol. 70, p. 054307, 2004.
- [9] N. Itagaki, H. Masui, M. Ito, and S. Aoyama *Phys. Rev. C*, vol. 71, p. 064307, 2005.
- [10] H. Masui and N. Itagaki *Phys. Rev. C*, vol. 75, p. 054309, 2007.
- [11] W. von Oertzen, M. Freer, and Y. Kanada-En'yo *Phys. Rep.*, vol. 432, pp. 43–113, 2006.
- [12] M. Freer and H. O. U. Fynbo *Progress in Particle and Nuclear Physics*, vol. 78, pp. 1–23, 2014.
- [13] M. Freer, H. Horiuchi, Y. Kanada-En'yo, D. Lee, and U.-G. Meißner *Nucl. Th.*, 2017.
- [14] R. Bijker and F. Iachello *Phys. Rev. C*, vol. 61, p. 067305, 2000.
- [15] R. Bijker and F. Iachello *Annals of Physics*, vol. 298, pp. 334–360, 2002.
- [16] R. Bijker and F. Iachello *Nucl. Phys. A*, vol. 957, pp. 154–176, 2017.
- [17] D. J. Marin-Lambarri, R. Bijker, M. Freer, M. Gai, T. Kokalova, D. J. Parker, and C. Wheldon *Phys. Rev. Lett.*, vol. 113, p. 012502, 2014.
- [18] R. Bijker and O. A. Díaz-Caballero *Phys. Scr.*, vol. 92, p. 124001, 2017.
- [19] V. D. Rocca, R. Bijker, and F. Iachello, “Single-particle levels in cluster potentials,” *Nuclear Physics A*, vol. 966, pp. 158–184, 2017.

- [20] A. Volkov, “Equilibrium deformation calculations of the ground state energies of 1p shell nuclei,” *Nuclear Physics*, vol. 74, no. 1, pp. 33–58, 1965.
- [21] M. Hamermesh, *Group Theory and Its Application to Physical Problems*. Dover Publications, 1962.
- [22] H. Volker, *Group Theory in Quantum Mechanics*. Dover Publications, 1960.
- [23] “National Nuclear Data Center.” <http://www.nndc.bnl.gov/>.
- [24] V. D. Rocca and F. Iachello, “Cluster-shell model: I. structure of 9 be, 9 b,” *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 966, no. 1, p. 012039, 2018.