

**Universidade Federal de Santa Catarina
Programa de Pós-Graduação em Físico-Química**

**HAMILTONIANAS COLETIVAS
PARA RESSONÂNCIAS GIGANTES DE DIPOLO**

Dissertação

Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Físico-Química
da Universidade Federal de Santa Catarina
para obtenção do grau de
MESTRE EM CIÊNCIAS

LUCIARA INDRUSIAK WEISS

UFSC

Florianópolis, julho de 1991

**HAMILTONIANAS COLETIVAS
PARA RESSONÂNCIAS GIGANTES DE DIPOLO**

LUCIARA INDRUSIAK WEISS

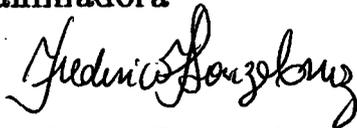
Esta dissertação foi julgada adequada para obtenção do título de
MESTRE EM CIÊNCIAS
especialidade Físico-Química e aprovada em sua forma final pelo Pro-
grama de Pós-Graduação.



Prof. Frederico Firmo de Souza Cruz - Orientador

Prof. Ademir Neves - Coordenador do Curso

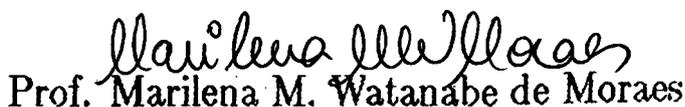
Banca Examinadora



Prof. Frederico Firmo de Souza Cruz - Presidente



Prof. José Ricardo Marinelli



Prof. Marilena M. Watanabe de Moraes

Para Antônio, Alisson e Vinícius

Agradecimentos

Ao Prof. Frederico Firmo de Souza Cruz, pela orientação.

A Antônio Cobos, por todo o apoio e também pela ajuda na digitação.

Aos meus pais, Léa e Juarez, e minha irmã, Siomara, pelo estímulo e colaboração.

Aos colegas da Pós-Graduação e todos os amigos que, de uma forma ou de outra me acompanharam ao longo do curso.

Aos agentes financiadores, CAPES e CNPQ.

INDICE

Introdução.....	1
Capítulo 1	
1.1. Método Semiclássico	7
1.2. Método de Coordenadas Geradoras.....	10
Capítulo 2	
2.1. Obtenção das Hamiltonianas Coletivas	
2.1.1. Ressonância Gigante de Dipolo.....	14
2.1.2. Hamiltoniana de muitos corpos.....	16
2.1.3. Hamiltoniana Coletiva do MSC	17
2.1.4. Hamiltoniana Coletiva do MCG.....	19
2.2. Resultados.....	21
2.2.1. Potencial e inverso da massa	23
2.2.2. Autovalores e Autovetores	36
2.3. Comentários	43
Conclusões.....	46
Apêndices	
1.Cálculo dos Potenciais Coletivos – Programa em REDUCE.....	47
2.Cálculo da Matriz H – Programa em REDUCE.....	57
3.Expansão na não localidade	66
Referências Bibliográficas	68

Resumo

Neste trabalho, construímos analiticamente as hamiltonianas coletivas para Ressonância Gigante de Dipolo (RGD) no modo de Goldhaber-Tellér. Na construção das hamiltonianas, utilizamos os Métodos Semiclássico e de Coordenadas Geradoras.

Partimos de um conjunto de funções de onda de muitos corpos convenientemente parametrizados e de uma hamiltoniana microscópica, no caso a hamiltoniana de Skyrme.

Aplicamos as hamiltonianas coletivas assim obtidas, ao estudo da Ressonância Gigante de Dipolo nos núcleos de He^4 , O^{16} e Ca^{40} . Obtemos, assim, as energias e espectros desse movimento coletivo, nos núcleos acima citados. Comparamos os dois conjuntos de resultados (MSC e MCG), fazendo uma análise sobre os efeitos da energia de ponto zero.

Abstract

In this work, we construct analytically the Collective Hamiltonian for the Giant Dipole Resonance (GDR) in the Goldhaber-Teller Model. We use, here the Semiclassical and Generator Coordinates methods.

We begin by a conveniently parametrized set of many body wave functions and a microscopic hamiltonian, the Skyrme hamiltonian.

We then apply these collective hamiltonians to the investigation of the GDR in the He^4 , O^{16} and Ca^{40} nuclei. Also, we get the energies and spectra of the GDR in these nuclei. We compare the two sets of results and analyse the zero point energy effects.

Introdução

O núcleo tem se mostrado um objeto extremamente rico no que diz respeito à diversidade de fenômenos que envolvem seus nucleons (prótons e neutrons).

As interações entre os nucleons, muitas vezes levam-nos a identificar o núcleo como um gás de nucleons aprisionados por um potencial atrativo que eles mesmos formam. Outras vezes, o tipo de interação nucleônica é tal que permite identificar o núcleo com uma gota líquida, onde os nucleons têm seus movimentos correlacionados. Há, ainda, situações nas quais o núcleo pode ser identificado com um corpo elástico.

A obtenção de uma visão unificada dos fenômenos nucleares tem sido o objetivo de uma parte substancial da comunidade de físicos nucleares desde o final dos anos 40, quando foi apresentado o Modelo de Camadas (ou de Partícula Independente) e demonstrada sua grande capacidade de previsão e descrição das excitações nucleares. Esse modelo, descrevendo o núcleo como um gás, causou um grande choque^(1,7), pois o até então modelo predominante (Gota Líquida) mostrava um núcleo onde o movimento dos nucleons estava correlacionado.

O Modelo da Gota Líquida havia sido feliz, por exemplo, na célebre discussão sobre a fissão nuclear.

A característica fundamental do "gás de nucleons", idéia básica do Modelo de Camadas, é que os próprios nucleons são responsáveis pelo potencial no qual estão inseridos. O campo associado a esse potencial, denominado campo médio, é, portanto, efeito e causa do comportamento dos nucleons.

O campo médio representa a interação média sofrida por cada nucleon, devido aos demais e descreve o estado fundamental do núcleo, em primeira aproximação.

No contexto de campo médio, qualquer excitação tem origem em excitações do tipo partícula-buraco. Entretanto, há alguns tipos de excitação em que um caráter coletivo sobrepõe-se ao de partícula única. São as excitações coletivas, associadas às variações do campo médio.

Uma excitação é coletiva sempre que os nucleons se movem de maneira coerente. Entende-se por movimento coerente, o movimento em que uma grande parte dos nucleons sofre um mesmo tipo de excitação e, além disso, as funções de onda de todos os nucleons assim excitados combinam-se com fases iguais, formando um estado, o estado coletivo, em que o caráter coletivo se sobrepõe aos demais.

Quando os fenômenos coletivos e não coletivos (de partícula única) ocorrem em escalas de energia muito diferentes, podemos considerar que não existe acoplamento entre os dois tipos de excitação.

A gama dos fenômenos nucleares coletivos é bastante vasta, mas vamos nos ater à Ressonância Gigante de Dipolo (RGD). Este modo coletivo consiste na vibração relativa entre prótons e neutrons. Os prótons, excitados por fótons, elétrons ou por colisões entre núcleos, movimentam-se coletivamente, afastando-se dos neutrons. A interação nuclear age, nesse caso, como um potencial que tenta restaurar a distribuição homogênea dos nucleons.

As ressonâncias gigantes são excitações coletivas de pequena amplitude, alta frequência, que começaram a ser estudadas a partir de sua descoberta por Baldwin e Klaiber (1947,1948) em experimentos de foto-absorção. Foram assim denominadas porque a secção de choque de foto-absorção mostrava um comportamento semelhante ao das ressonâncias usuais e, além disso, seu valor era muito elevado, refletindo a participação de muitos nucleons ⁽¹⁴⁾.

Os estudos experimentais demonstraram que as excitações do tipo RGD eram comuns a todos os núcleos e as energias de excitação podiam ser ajustadas através de uma fórmula dada por ⁽¹⁴⁾

$$E_m = 31.2 A^{-\frac{1}{3}} + 20.6 A^{-\frac{1}{6}} \text{ MEV}$$

Os modelos fenomenológicos propostos para explicar os dados experimentais têm uma forte ligação com o Modelo da Gota Líquida. No modelo de Goldhaber-Teller ⁽⁵⁾, o núcleo é visto como constituído de dois fluidos interpenetrantes sujeitos a uma força restauradora proporcional à energia de simetria de superfície. Nesse caso, os dois fluidos estão em esferas que não se deformam (figura 1,b).

O modelo de Goldhaber-Teller prevê uma energia de excitação dada por

$$E \propto A^{-\frac{1}{6}}$$

Já no modelo de Steinwedel-Jensen, os dois fluidos estão aprisionados na mesma esfera fixa e as vibrações são, assim, originadas das variações locais das densidades entre prótons e neutrons (figura 1,a). Nesse modelo, a energia de excitação é

$$E \propto A^{-\frac{1}{3}}$$

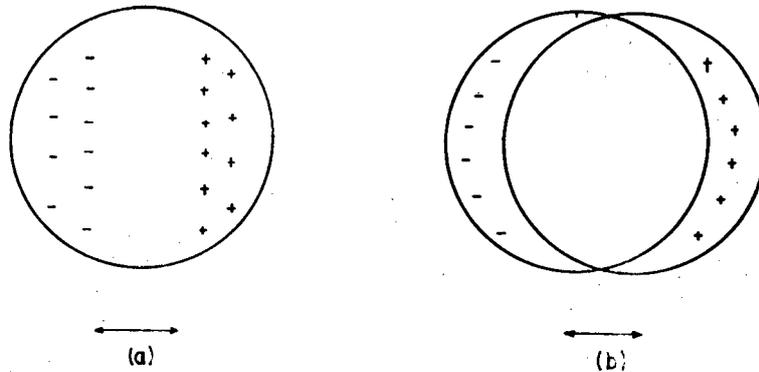


Figura 1

Vemos, então, que os dois modos convivem no núcleo e seria possível reproduzir os dados experimentais ao longo da tabela periódica com um modelo que incorporasse esses dois modos.

Recentemente, Myers et al demonstraram que o modo de Goldhaber-Teller predomina nos núcleos mais leves, enquanto o modelo de Steinwedel-Jensen predomina nos núcleos pesados ⁽¹¹⁾.

Duas características importantes da RGD devem, ainda, ser citadas. Primeiro, ela exaure a regra de soma de Thomas-Reiche-Kuhn, a qual é um limite teórico para absorção da radiação de dipolo elétrico. Isso deixa evidente seu caráter coletivo. Segundo, a largura da RGD é uma função suave do número de nucleons.

Nesse trabalho, vamos tratar a RGD do ponto de vista microscópico, isto é, a partir da interação nucleon-nucleon.

Microscopicamente, as RGD são uma combinação coerente de excitações de partícula-buraco causadas por algum campo externo. Para ilustrar, vamos tomar como exemplo um modelo de camadas onde as paridades das camadas vizinhas se alternam e cujas diferenças de energia são da ordem de $\Delta E = \hbar\omega = 41 A^{-\frac{1}{2}}$. Nesse modelo, as

excitações de partícula- buraco que podem gerar uma ressonância gigante de dipolo são tais que envolvem estados que diferem de $\hbar\omega$ em energia e com paridades diferentes.

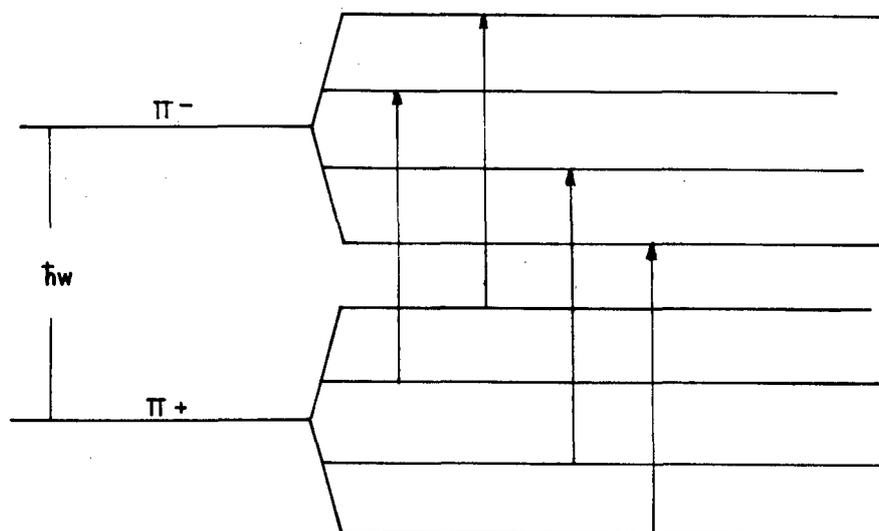


Figura 2

Na figura 2, as quatro transições satisfazem às regras de seleção para uma transição dipolar. Se as amplitudes dessas transições somarem-se de forma coerente, teremos uma transição dipolar coletiva.

A imagem microscópica acima nos permite observar que as excitações coletivas se dão dentro de um certo subconjunto de estados que satisfazem determinadas características. Este subconjunto constitui o subespaço coletivo. Uma descrição da dinâmica coletiva pode, então, ser obtida projetando-se a dinâmica de muitos corpos a este subespaço.

Essa imagem nos permite obter uma metodologia para o enfoque microscópico. Tomemos como ponto de partida um modelo de camadas, por exemplo, um oscilador harmônico. A escolha de um operador de excitação adequado nos permite construir o subespaço das excitações coletivas. A dinâmica pode, então, ser obtida através da construção de um projetor ou de algum princípio variacional.

A metodologia acima será aplicada no tratamento que faremos da RGD. Em muitos casos, é possível explorar as estruturas algébricas e de grupo dos operadores de excitação e obter, assim, uma estrutura para o subespaço coletivo. Como veremos, no caso da RGD os estados coletivos serão parametrizados por parâmetros canônicos (q,p) , isto é

$$|q, p\rangle = U(q, p) |\Phi_0\rangle$$

$$U(q, p) = \exp iG(q, p)$$

Nas equações acima, $|\Phi_0\rangle$ é o estado fundamental do modelo de camadas e $G(q,p)$ é um operador de um corpo associado a uma excitação coletiva caracterizado por dois parâmetros.

No método Semiclássico, explicado em detalhes no próximo capítulo, pode-se obter uma hamiltoniana coletiva a partir da quantização da hamiltoniana clássica

$$H_{cl}^{msc}(q, p)$$

definida por

$$H_{cl}^{msc} = \langle q, p | \hat{H} | q, p \rangle$$

onde \hat{H} é a hamiltoniana de muitos corpos.

Ainda explorando a estrutura algébrica dos operadores $G(q,p)$, veremos que é possível, através do ansatz de Griffin-Hill-Wheeler ⁽⁶⁾, do método de Coordenadas Geradoras,

$$|\psi\rangle = \int f(q, p) |q, p\rangle dq dp$$

mostrar que o subespaço coletivo é completo e fechado e permite a construção de um projetor \hat{P} .

A hamiltoniana coletiva é obtida projetando-se a hamiltoniana de muitos corpos nesse subespaço ⁽⁸⁾.

$$\hat{H}^{mcg} = \hat{P}^\dagger \hat{H} \hat{P}$$

O grau de liberdade coletivo, introduzido com os dois métodos acima citados, é selecionado com base na fenomenologia.

As duas últimas expressões trazem à tona o outro ingrediente das teorias microscópicas, a hamiltoniana de muitos corpos H .

O uso de hamiltonianas com interações efetivas é bastante comum nos estudos dos movimentos nucleares. Essas interações são construídas com base em vasto estudo que se destina a construir, microscopicamente, a interação nncleon-nucleon efetiva. O que as caracteriza como "fenomenológicas" é um certo conjunto de parâmetros introduzidos para ajustar os resultados teóricos aos dados experimentais. Ao longo deste trabalho, vamos utilizar a Hamiltoniana de Skyrme⁽¹¹⁾, a qual já descreveu com sucesso as características do estado fundamental nuclear⁽¹⁵⁾ e tem se mostrado adequada à análise de ressonâncias gigantes.

Neste trabalho, construímos a Hamiltoniana Coletiva da RGD pelos métodos Semi-clássico e de Coordenadas Geradoras. No capítulo 1, descrevemos estes dois métodos. No capítulo 2, obtemos as hamiltonianas coletivas para os núcleos de He^4 , O^{16} e Ca^{40} , a partir da teoria desenvolvida na referência 8, a qual envolve os dois métodos acima citados. Também no capítulo 2, obtemos os espectros das hamiltonianas coletivas, comentamos e comparamos nossos resultados com resultados obtidos por outros autores. Finalizando, apresentamos nossas conclusões.

1.1. Método Semiclássico (MSC)

No MSC por nós utilizado ⁽⁸⁾, assumimos a aproximação de campo médio para o núcleo. Nesse caso, todos os estados nucleares são descritos por determinantes de Slater. O método consiste em parametrizar esses estados nucleares, de maneira que eles descrevam o que ocorre com o sistema durante o movimento coletivo específico que queremos estudar. Com esses estados parametrizados e com uma hamiltoniana de muitos corpos, constrói-se a hamiltoniana coletiva clássica do MSC, que é definida como o valor médio da hamiltoniana de muitos corpos \hat{H} nos estados parametrizados, aqui chamados $|p, q\rangle$.

$$H_{cl}^{msc} = \langle pq | \hat{H} | pq \rangle \quad (1)$$

Trabalharemos com estados parametrizados de tal maneira que satisfaçam as seguintes condições:

$$\begin{aligned} \langle p, q | [\hat{Q}, \hat{P}] | p, q \rangle &= i \\ \langle p, q | \hat{Q} | pq \rangle &= q \\ \langle p, q | \hat{P} | pq \rangle &= p \end{aligned} \quad (2)$$

onde \hat{P} e \hat{Q} são operadores coletivos.

Nesse caso, aplicando o princípio de mínima ação

$$\delta \int \langle p, q | \hat{H} - i\partial_t | p, q \rangle dt$$

chegamos às equações

$$\frac{\partial}{\partial q} H_{cl}^{msc}(pq) = -\dot{p} \quad (3)$$

$$\frac{\partial}{\partial p} H_{cl}^{msc}(pq) = \dot{q} \quad (4)$$

Temos, acima, as equações de Hamilton clássicas, para o valor médio $H_{cl}^{msc}(p, q)$, e os parâmetros p e q . As equações (3) e (4) mostram que os parâmetros p e q têm

comportamento de coordenadas generalizadas canonicamente conjugadas, o que justifica sua utilização na construção da hamiltoniana clássica do MSC.

Uma possível parametrização de $|p, q\rangle$ é a que usamos neste trabalho:

$$|p, q\rangle = \exp(-iq\hat{P})\exp(ip\hat{Q})|0\rangle \quad (5)$$

Esta parametrização do estado é baseada na fenomenologia. Como veremos posteriormente, ela nos fornece uma ótima descrição dos estados coletivos do fenômeno por nós estudado. Em (5), impomos que \hat{P} e \hat{Q} sejam geradores de excitações tais que satisfaçam as condições (2), e que o estado de referência $|0\rangle$ seja um determinante de Slater que especifica o estado fundamental do núcleo. Nessas condições, $|p, q\rangle$ é um pacote de onda com características coletivas, q e p são interpretados fisicamente como valores médios de operadores coletivos e as equações (3) e (4) descrevem a evolução temporal de valores médios de operadores coletivos com uma hamiltoniana clássica.

A hamiltoniana (1) pode ser expandida nos momentos p . No limite adiabático (baixos momentos), a hamiltoniana será dada por

$$H_{cl}^{msc} = \frac{p^2}{2\mu(q)} + v(q) \quad (6)$$

Na equação (6), $v(q)$ e $\mu(q)$ e $|q\rangle$ são definidos da seguinte maneira:

$$\frac{1}{\mu(q)} = \langle q | [\hat{Q}, [\hat{H}, \hat{Q}]] | q \rangle \quad (7)$$

$$v(q) = \langle q | \hat{H} | q \rangle \quad (8)$$

$$|q\rangle = |p=0, q\rangle$$

Para construir a hamiltoniana coletiva quântica do MSC, considera-se a hipótese fundamental do MSC: a hamiltoniana (6) é o limite clássico de uma hamiltoniana coletiva quântica. Essa hamiltoniana quântica é obtida por um processo de requantização, onde os parâmetros p e q são substituídos pelos operadores coletivos \hat{P} e \hat{Q} .

A hamiltoniana coletiva quântica do MSC adotada em nosso trabalho tem a seguinte forma:

$$\hat{H}_q^{msc}(\hat{P}, \hat{Q}) = \frac{1}{4} \left[\hat{P}^2 \frac{1}{2\hat{M}(\hat{Q})} + \frac{1}{2\hat{M}(\hat{Q})} \hat{P}^2 + 2\hat{P} \frac{1}{2\hat{M}(\hat{Q})} \hat{P} \right] + \hat{V}(\hat{Q}) \quad (9)$$

A obtenção da hamiltoniana $H_q^{msc}(\hat{P}, \hat{Q})$ envolve alguns problemas, inerentes ao processo de requantização. Estes problemas são estudados na referência 8.

Um dos problemas está relacionado à substituição de p e q pelos operadores \hat{P} e \hat{Q} . Os parâmetros p e q são valores médios de \hat{P} e \hat{Q} , tomados nos pacotes $|\hat{p}, \hat{q}\rangle$. Esses pacotes não são autoestados de \hat{P} e \hat{Q} , o que significa que há uma incerteza na medida da posição e do momento do pacote. O pacote possui uma dispersão, dada por ΔP e ΔQ . À dispersão do pacote, está associada uma energia, denominada energia de ponto zero (Epz), que se incorpora à hamiltoniana (6) através dos parâmetros p e q . Por isso, a substituição de p e q por \hat{P} e \hat{Q} só é justificável se Epz for desprezível.

Outro problema está relacionado à dependência do operador de massa, \hat{M} , em \hat{Q} . Devido a essa dependência, a hamiltoniana (6) pode ser o limite clássico de várias hamiltonianas quânticas, todas elas com diferentes ordenamentos de \hat{P} e \hat{Q} . Os efeitos relacionados às diferenças de ordenamentos estão ligadas aos efeitos da Epz. Se a Epz for desprezível, podemos desconsiderar os efeitos do ordenamento.

Podemos ter uma melhor avaliação dos efeitos da Epz, se compararmos a hamiltoniana (9) com uma hamiltoniana de algum método puramente quântico, ou seja, que não tenha nenhum estágio clássico. O método descrito a seguir satisfaz este quesito.

1.2. Método das Coordenadas Geradoras (MCG)

A idéia na qual se baseia o MCG é que os modos coletivos de um sistema estão relacionados às variações temporais do campo médio. Assim, o estado coletivo do MCG é uma combinação linear de vários determinantes de Slater, cada um deles associado a uma forma assumida pelo campo médio.

Nesse contexto, a função de onda coletiva é dada pelo ansatz de Griffin-Hill-Wheeler

$$|\Psi\rangle = \int f(q) |q\rangle dq \quad (10)$$

onde

$\{|q\rangle\}$ é um conjunto de determinantes de Slater denominados estados geradores

$\{q\}$ é um conjunto de parâmetros associados a um grau de liberdade coletivo - esses parâmetros são denominados coordenadas geradoras

$f(q)$ - é uma função peso

No método original ⁽⁶⁾, a função $f(q)$ é determinada por um princípio variacional, no qual se estabelece que o valor médio da hamiltoniana do sistema nuclear deve ser um mínimo com respeito à variação de $f(q)$

$$\frac{\partial E}{\partial f(q)} = 0 \quad (11)$$

Através do princípio variacional, obtém-se uma equação para $f(q)$, conhecida como equação integral de Hill-Wheeler:

$$\int dq' \langle q | \hat{H} | q' \rangle f(q') = E \int dq' \langle q | q' \rangle f(q') \quad (12)$$

Uma variante do MCG foi apresentada por Piza e Passos ⁽¹⁰⁾, aplicável quando a função de superposição dos estados geradores

$$\eta(q, q') = \langle q | q' \rangle \quad (13)$$

é um kernel de Hilbert-Schmidt.

A função (13) é diagonalizada

$$\int \eta(q, q') u_k(q') dq' = \lambda_k u_k(q)$$

e são construídos vetores $|k\rangle$, definidos da seguinte maneira:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \int u_k(q) |q\rangle dq$$

onde $u_k(q)$ e λ_k são, respectivamente, autofunções e autovalores de $\eta(q, q')$.

Os vetores $\{|k\rangle\}$ são ortonormais para $\lambda_k \neq 0$ e formam um subespaço fechado no espaço de Hilbert de muitos corpos, denominado subespaço coletivo (Sc).

Quando a diagonalização de $\eta(q, q')$ gera um subespaço finito de autofunções $u_k(q)$ associadas a autovalores λ_k não nulos, o subespaço gerado por (12) é idêntico ao subespaço coletivo definido pelos vetores $\{|k\rangle\}$.

Pode-se, então, construir um operador de projeção nesse subespaço

$$\hat{S}_c = \int dk |k\rangle \langle k|$$

e definir a hamiltoniana coletiva como a projeção de \hat{H} no subespaço coletivo

$$\hat{H}^{mcg} = \hat{S}_c \hat{H} \hat{S}_c \quad (14)$$

Segundo Piza e Passos, a consequência da teoria acima é que a solução da equação de Hill-Wheeler é equivalente à resolução da equação de Schrödinger para a hamiltoniana coletiva.

Em nosso trabalho, devíamos, a princípio, construir o projetor \hat{S}_c a partir dos estados geradores $|p, q\rangle$. Entretanto, como foi demonstrado na referência 8, para pacotes de onda descritos por (5), tais que \hat{Q} e \hat{P} satisfazem as seguintes condições

$$\hat{B} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{Q}}{b_0} + i\hat{P}b_0 \right)$$

onde

$$\hat{B} |0\rangle = 0 \quad (15)$$

$$b_0^2 = 2\langle 0 | \hat{Q}^2 | 0 \rangle$$

o subespaço coletivo obtido por $|p, q\rangle$ é idêntico a um subespaço coletivo obtido a partir de

$$|q\rangle = |q, p=0\rangle$$

Dizemos que $|q\rangle$ e $|p, q\rangle$ são estados redundantes.

Nesses casos ($|p, q\rangle$ é um estado coerente generalizado), a função de superposição

$$\eta(q, q') = \langle q | q' \rangle$$

é gaussiana.

A função de superposição gaussiana pode ser diagonalizada por meio de uma transformada de Fourier. Da referência 10, temos que a autofunção e o autovalor de $\eta(q, q')$ são dados, respectivamente, por

$$u_k(q) = \frac{\exp(ikq)}{\sqrt{2\pi}} \quad (16)$$

e

$$\lambda_k = \frac{b_0}{\sqrt{\pi}} \exp(-k^2 b_0^2) \quad (17)$$

A referência 10 mostra que, também nesse caso particular, podemos aplicar a variante do MCG a que nos referimos anteriormente. Temos, então, a representação do subespaço coletivo para uma coordenada geradora

$$|k\rangle = \frac{1}{2\pi} \int dq \frac{\exp(iqk)}{\sqrt{\lambda_k}} |q\rangle \quad (18)$$

Os operadores coletivos são definidos, no subespaço coletivo, como

$$\hat{P}_c = \hat{S}_c \hat{P} \hat{S}_c \quad (19)$$

$$\hat{Q}_c = \hat{S}_c \hat{Q} \hat{S}_c$$

onde \hat{P} e \hat{Q} são operadores definidos no espaço de muitos corpos.

A hamiltoniana coletiva do MCG pode, então, ser escrita como

$$\hat{S}_c \hat{H} \hat{S}_c = \hat{S}_c \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2^m} : \hat{P}^m H^m(\hat{Q}) : \right\} \hat{S}_c$$

onde

$$: \hat{P}^m H^m(\hat{Q}) : := \{ \hat{P}, \{ \hat{P} \dots \{ \hat{P}, \hat{H}^m(\hat{Q}) \} \} \}$$

Se tomarmos uma expansão até 2^o ordem nos momentos coletivos teremos

$$\hat{H}^{mcg} = \frac{1}{4} \left\{ \hat{P}_s, \left\{ \hat{P}_s, \frac{1}{2M(\hat{Q}_s)} \right\} \right\} + V(\hat{Q}_s) \quad (20)$$

O potencial e a massa quântica são assim definidos:

$$V(\hat{Q}_s) = H^{(0)}(\hat{Q}_s) \quad (21)$$

$$\frac{1}{2M(\hat{Q}_s)} = H^{(2)}(\hat{Q}_s) \quad (22)$$

onde

$$H^{(m)}(x) = \frac{1}{(2\pi)^2 m! \hbar^m} \int dk_0 dq dq' \left\{ \exp(ixk_0) \exp[-ik_0 \frac{(q+q')}{2}] \right. \\ \left. \left[\frac{\partial}{\partial k^m} \frac{\exp[-ik(q-q')](q|\hat{H}|q')}{\sqrt{\lambda(k+\frac{k_0}{2})\lambda(k-\frac{k_0}{2})}} \right]_{k=0} \right\} \quad (23)$$

Na expressão (23), x é a coordenada coletiva, definida por $\hat{Q}_s |x\rangle = x |x\rangle$, onde $|x\rangle$ é a transformada de Fourier de $|k\rangle$.

O MCG e o MSC coincidem se a hamiltoniana clássica $H_{cl}^{m,sc}(p, q)$ for o limite clássico de $\hat{H}^{mcg}(\hat{P}, \hat{Q})$, a menos de uma constante. Como a diferença entre $H_{cl}^{m,sc}(p, q)$ e H^{mcg} é a Epz, os efeitos de Epz devem ser desprezíveis para que os dois métodos sejam equivalentes ⁽⁸⁾.

2.1. Obtenção das Hamiltonianas Coletivas

2.1.1. Ressonância Gigante de Dipolo (RGD)

No Modelo Hidrodinâmico Coletivo, de Goldhaber e Teller, o núcleo é descrito como composto por dois fluidos interpenetrantes e incompressíveis com superfícies fixas. Um fluido é o conjunto de prótons e o outro é o conjunto de neutrons. Segundo esse modelo, a RGD é uma vibração harmônica do fluido de prótons contra o fluido de neutrons. Esse modelo foi modificado por Steinwedel-Jensen, que propuseram que a distribuição total de nucleons mantém uma forma fixa, enquanto que as distribuições de prótons e neutrons, individualmente, podem modificar sua forma.

A RGD pode ser considerada uma mistura desses dois modelos, sendo que o modelo de Goldhaber-Teller é predominante para núcleos leves.

Neste trabalho, desenvolvemos um cálculo microscópico baseado no modelo de Goldhaber-Teller. Assim, temos uma esfera de prótons que se move contra uma esfera de neutrons, sendo que essa vibração não é, em princípio, harmônica. Partimos da função de onda de muitos corpos (5) e da Hamiltoniana de muitos corpos, de Skyrme.

A função de onda de muitos corpos que descreve o movimento de prótons contra neutrons é

$$|p, q\rangle = \exp(-iq\hat{P})\exp(ip\hat{Q}) |0\rangle \quad (24)$$

onde \hat{Q} e \hat{P} são geradores de translação e momento, respectivamente, definidos, no caso $N = Z$, por

$$\begin{aligned} \hat{Q} &= \frac{2}{A} \sum_i \hat{x}_3(i) \hat{\tau}_3(i) \\ \hat{P} &= \frac{1}{2} \sum_i \hat{p}_3(i) \hat{\tau}_3(i) \end{aligned} \quad (25)$$

onde

$\hat{x}_3(i)$ e $\hat{p}_3(i)$ são coordenada e momento do nucleon i

$\hat{\tau}_3(i)$ é a terceira componente do operador de isospin do nucleon i .

$|0\rangle$ é um determinante de Slater que descreve o estado fundamental nuclear. Podemos ver que o estado (24) representa um estado no qual as funções de onda de partícula

única sofrem uma translação q com momento p . O operador de isospin faz com que as translações de neutrons e prótons tenham sentidos opostos.

Assumimos que o estado de referência $|0\rangle$ é um determinante de Slater de funções de onda de oscilador harmônico.

Essa suposição é bastante razoável do ponto de vista do modelo de camadas, particularmente para núcleos de camada fechada $N=Z$. Devido a essa escolha para o estado $|0\rangle$, os estados $|p, q\rangle$ têm as propriedades (2), listadas no capítulo anterior. Além disso,

$$(\hat{Q} + i\hat{P}b_0^2)|0\rangle = 0 \quad (26)$$

Nas propriedades listadas acima, temos:

$$b_0 = \left(\frac{4}{A}\right)^{\frac{1}{2}} a_0 = \left(\frac{\hbar}{\mu\omega_0}\right)^{\frac{1}{2}}$$

onde μ é a massa reduzida do sistema de prótons e neutrons, dada por

$$\mu = \frac{Am}{4}$$

e a_0 é o parâmetro de oscilador harmônico associado às funções de onda de partícula independente.

Pode-se, ainda, definir operadores bosônicos

$$B^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{Q}}{b_0} - i\hat{P}b_0 \right)$$

$$B = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\hat{Q}}{b_0} + i\hat{P}b_0 \right)$$

Esses operadores podem ser interpretados como operadores bosônicos coletivos associados ao modo de Goldhaber-Teller e podem ser usados na comparação com teorias fenomenológicas onde as vibrações coletivas são descritas através de bósons.

Observamos que a propriedade (26) identifica nosso estado fundamental $|0\rangle$ com o vácuo de boson, o que, como já vimos no capítulo 1, é suficiente para que os estados $|p, q\rangle$ e $|q\rangle$ sejam redundantes.

Então podemos aplicar aos estados $|q\rangle$ o formalismo desenvolvido no capítulo 1.

2.1.2. Hamiltoniana de muitos corpos

Utilizamos, em nosso trabalho, uma Hamiltoniana de muitos corpos com interação de Skyrme ⁽¹¹⁾.

$$H = \sum_i t(i) + \sum_{i<j} V_{ij} + \sum_{i<j<k} V_{ijk} \quad (27)$$

A escolha dessa Hamiltoniana se deve ao fato de que ela se mostrou adequada ao tratamento microscópico de fenômenos coletivos. Ela foi usada, por exemplo, por Floard-Vautherin ⁽³⁾ no tratamento da RGD.

A interação de Skyrme é uma interação efetiva contendo um termo de dois corpos e um termo de três corpos.

A parte de dois corpos vem de uma expansão de curto alcance da interação nucleon-nucleon e é dada por

$$\begin{aligned} V(1, 2) = & t_0(1 + x_0 \hat{P}^\sigma) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + \\ & \frac{1}{2} t_1 [\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k}^2 + \vec{k}^2 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)] + t_2 \vec{k} \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} + \\ & i W_0 (\vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)}) \vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} \end{aligned} \quad (28)$$

onde

\vec{k} é o operador de momento relativo

\hat{P}^σ é o operador de troca de spin e

σ é matriz de Pauli.

A parte de três corpos é associada a uma força de alcance 0 e tem a forma

$$V(1, 2, 3) = t_3 \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_3) \quad (29)$$

Em (28) o termo em t_0 é uma interação delta, com troca de spin. Os termos em t_1 e t_2 dependem do momento relativo dos nucleons interagentes

$$\vec{k} = \frac{1}{2i} (\vec{\nabla}_1 - \vec{\nabla}_2)$$

e simulam um alcance efetivo. O quarto termo de (28) representa uma interação spin-órbita de dois corpos. Como estamos considerando núcleos de camada fechada, o termo spin-órbita se anula.

Para núcleos de camada fechada, o termo (29) torna-se equivalente a uma interação de dois corpos, dependente da densidade.

As constantes t_0, t_1, t_2, t_3, x_0 e W_0 são obtidas a partir de ajuste com resultados experimentais e formam conjuntos denominados Skyrme I, II, etc⁽¹⁵⁾. No nosso caso, usamos Skyrme III.

Definidos os estados e a Hamiltoniana de muitos corpos, podemos aplicar o formalismo desenvolvido no capítulo anterior na construção das Hamiltonianas Coletivas.

2.1.3. Hamiltoniana Coletiva do MSC

Do capítulo I, temos que

$$H^{msc}(p, q) = \langle p, q | \hat{H} | p, q \rangle \quad (30)$$

Com uma expansão em p , temos⁽⁸⁾

$$H^{msc}(p, q) = \langle q | \hat{H} | q \rangle + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{p^{2n} (-1)^n}{(2n)!} \langle q | [\hat{Q} [\hat{Q} \dots [\hat{Q}, \hat{H}] \dots]] | q \rangle \quad (31)$$

onde o número de comutadores que aparece no último termo é $2n$ e

$$|q\rangle = \exp(iq\hat{P})|0\rangle$$

Com a introdução da Hamiltoniana de Skyrme em (31) obtemos

$$[\hat{Q}, [\hat{Q}, \hat{H}]] = \frac{1}{\mu} + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{4(t_1 + t_2)}{A^2} \delta(\vec{x}_i - \vec{x}_j) (1 - \tau_3(i)\tau_3(j)) \quad (32)$$

Para n -comutadores, temos, para (32)

$$[\hat{Q}, [\dots [\hat{Q}, \hat{H}] \dots]] = 0 \quad \text{para } n > 2$$

Assim, sem recorrer a aproximações, obtemos, para a Hamiltoniana do MSC a expressão

$$H^{msc}(p, q) = \frac{p^2}{2\mu(q)} + v(q) \quad (33)$$

onde

$$v(q) = \langle q | \hat{H} | q \rangle - \langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle \quad (34)$$

$$\frac{1}{\mu(q)} = \langle q | [\hat{Q}, [\hat{Q}, \hat{H}]] | q \rangle \quad (35)$$

e $\langle 0 | \hat{H} | 0 \rangle$ foi subtraído em (34) por conveniência.

Tomando-se a interação de Skyrme, núcleos de camada fechada com $N = Z$, e desprezando-se a interação Coulombiana, obtém-se:

$$\begin{aligned} v(\bar{q}) = & \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\bar{r} \left\{ t_0 \left(1 + \frac{x_0}{2} \right) [\rho_0(\bar{r} + \bar{q})\rho_0(\bar{r}) - \rho_0(\bar{r})]^2 + \right. \\ & \left(\frac{1}{2} \right) (t_1 + t_2) [\rho_0(\bar{r} + \bar{q})\tau_0(\bar{r}) - \rho_0(\bar{r})\tau_0(\bar{r})] + \\ & \left(\frac{1}{8} \right) (t_2 - 3t_1) [\rho_0(\bar{r} + \bar{q})\nabla^2 \rho_0(\bar{r}) - \rho_0(\bar{r})\nabla^2 \rho_0(\bar{r})] + \\ & \left. \left(\frac{1}{2} \right) t_3 [\rho_0(\bar{r} + \bar{q})\rho_0^2(\bar{r}) - \rho_0^3(\bar{r})] \right\} \quad (36) \end{aligned}$$

A massa clássica é dada por

$$\frac{1}{\mu(\bar{q})} = \frac{1}{\mu} \left[1 + \frac{8\mu}{\hbar^2 A^2} (t_1 + t_2) \int_{-\infty}^{+\infty} d^3\bar{r} \rho_0(\bar{r} + \bar{q})\rho_0(\bar{r}) \right] \quad (37)$$

Nas expressões anteriores, ρ é a densidade de partículas e τ é a densidade de energia cinética, definidas assim:

$$\rho_0(\bar{r}) = \sum_{i,\sigma} \phi_i^0(\bar{r}, \sigma) \phi_i^0(\bar{r}, \sigma) \quad (38)$$

$$\tau_0(\bar{r}) = \sum_{i,\sigma} |\nabla \phi_i(\bar{r}, \sigma)|^2 \quad (39)$$

onde as somas são tomadas sobre todos os estados ocupados.

Vamos, agora, calcular a Hamiltoniana do MCG, com a ajuda das expressões obtidas acima.

2.1.4. Hamiltoniana Coletiva do MCG

Do capítulo anterior

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \hat{S}_c \hat{H} \hat{S}_c$$

A expressão analítica da Hamiltoniana do MCG é obtida a partir de uma expansão na não-localidade desta primeira expressão (Apêndice 3). No que segue, x representa a coordenada coletiva, definida anteriormente, e ξ representa a não-localidade.

Obtemos, com este procedimento

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \hat{S}_c \left\{ \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{2^m} : \hat{P}^m \hat{H}^m(\hat{Q}) : \right\} \hat{S}_c \quad (40)$$

com

$$: \hat{P}^m \hat{H}^m(\hat{Q}) := \{ \hat{P}, \{ \hat{P}, \dots \{ \hat{P}, \hat{H}^m(\hat{Q}) \} \} \}$$

e

$$\hat{H}^m(x) = \int d\xi \frac{(-i)^m}{m!} \left(x + \frac{\xi}{2} \mid [\hat{Q}, [\hat{Q}, \dots [\hat{H}, \hat{Q}]] \mid x - \frac{\xi}{2} \right)$$

Já vimos que, para a Hamiltoniana de Skyrme, os m -comutadores se anulam para $m > 2$. Então

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \hat{S}_c \left\{ H^{(0)}(\hat{Q}) + \frac{1}{4} \{ \hat{P}, \{ \hat{P}, H^{(2)}(\hat{Q}) \} \} \right\} \hat{S}_c \quad (41)$$

De acordo com as definições (21), (22) e (23), temos, para o potencial e o inverso da massa,

$$V(x) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_0 dq dq' \exp(ixk_0) \exp\left[\frac{-ik_0(q+q')}{2}\right] \frac{\langle q|\hat{H}|q'\rangle}{\lambda(\frac{k_0}{2})} \quad (42)$$

$$\frac{1}{M(x)} = \frac{1}{(2\pi)^2 \hbar^2} \int_{-\infty}^{+\infty} dk_0 dq dq' \exp(ixk_0) \left[\frac{\partial_k^2 \exp[-iq(\bar{k} + \frac{k_0}{2})] \langle q|\hat{H}|q'\rangle \exp[iq'(\bar{k} - \frac{k_0}{2})]}{\sqrt{\lambda(\bar{k} + \frac{k_0}{2})\lambda(\bar{k} - \frac{k_0}{2})}} \right]_{\bar{k}=0} \quad (43)$$

Para os estados $|q\rangle$ utilizados em nosso trabalho, a função de superposição é gaussiana e tem a seguinte forma

$$\langle q|q'\rangle = \exp\left[-\frac{(q-q')^2}{4b_0^2}\right] - \text{função de superposição} \quad (44)$$

A variável λ , em (43) é o autovalor da função de superposição

$$\lambda(k) = \frac{b_0}{\sqrt{\pi}} \exp[-k^2 b_0^2] - \text{autovalor da função de superposição} \quad (45)$$

Fazendo-se a seguinte mudança de variáveis

$$\begin{aligned} q_0 &= q - q' \\ q' &= \frac{q + q'}{2} \end{aligned} \quad (46)$$

obtemos o kernel de energia não diagonal que, com interação de Skyrme ⁽³⁾, é

$$\frac{\langle q|\hat{H}|q'\rangle}{\langle q||q'\rangle} = v(\bar{q}) - \frac{A^2 \hbar^2}{32a_0^2} \left(\frac{q_0}{2a_0}\right)^2 \frac{1}{\mu(\bar{q})} \quad (47)$$

Na expressão acima, $v(\bar{q})$ e $\frac{1}{\mu(\bar{q})}$ são, respectivamente, o potencial e o inverso da massa do MSC, definidos em (36) e (37).

As formas explícitas do potencial e inverso da massa, são obtidas introduzindo-se, em (36) e (37), as densidades $\rho_0(\vec{r})$ e $\tau_0(\vec{r})$, definidas para funções de onda de partícula única de oscilador harmônico.

2.2. Resultados

Com as expressões calculadas nas seções anteriores, podemos construir, analiticamente, hamiltonianas coletivas para a ressonância gigante de dipolo. Com as hamiltonianas, podemos obter funções de onda e espectros coletivos. Para esse fim, elaboramos um programa em linguagem REDUCE, que pode ser utilizado, em princípio, para núcleos com camada fechada e qualquer número de nucleons. Os dados de entrada são as densidades ρ e τ , o número de massa A e o parâmetro a_0 . Apresentamos a primeira parte do programa (obtenção analítica das hamiltonianas coletivas para a RGD) no Apêndice 1 e a segunda parte (cálculo dos elementos de matriz da hamiltoniana coletiva em uma base de oscilador harmônico) no Apêndice 2.

Aplicamos o programa aos núcleos de He^4 , O^{16} e Ca^{40} .

Comparamos nossos resultados com os resultados de Flocard-Vautherin ⁽³⁾ e Galetti ⁽⁴⁾.

A seguir, faremos uma breve explicação sobre as metodologias desses autores, de forma a poder entender melhor as diferenças entre seus resultados e os nossos.

Flocard e Vautherin partem da equação de Hill-Wheeler

$$\int [h(q, q') - E\eta(q, q')]f(q')dq' = 0$$

onde $h(q, q') = \langle q | H | q' \rangle$ e $\eta(q, q') = \langle q | q' \rangle$.

Esta equação é discretizada

$$\sum [h_{ij} - E\eta_{ij}]f(q_j) = 0$$

Com a diagonalização da função de superposição

$$\sum \eta_{ij}u_{j\alpha} = \lambda_\alpha u_{i\alpha}$$

pode-se, então, transformar a equação de Hill-Wheeler em uma equação de autovalores

$$H_{\alpha\beta}g_\beta = Eg_\alpha$$

onde

$$H_{\alpha\beta} = \frac{u_{\alpha j}}{\sqrt{\lambda_\alpha}} \langle q_j | H | q_i \rangle \frac{u_{\beta i}}{\sqrt{\lambda_\beta}}$$

e

$$g_\alpha = \frac{u_{\alpha i}}{\sqrt{\lambda_\alpha}} f(q_i)$$

Note-se que, nesse tipo de desenvolvimento, as soluções obtidas dependem de vários passos numéricos (discretização, diagonalização numérica de η , truncamento do espaço), os quais podem ser fontes de erros.

Galetti, obtém um kernel mapeador que fornece uma relação direta entre o kernel reduzido de energia do MCG $h(q, q')$ e uma representação da Hamiltoniana coletiva no espaço de fase, $H(q, p)$, utilizando transformadas de Weyl. Então, com uma transformada inversa, obtém o operador Hamiltoniana coletiva associado a $H(p, q)$.

$$\hat{H}(\hat{Q}, \hat{P}) = \int_{-\infty}^{\infty} M(\gamma, \eta; \hat{Q}, \hat{P}) \exp\left(\frac{i}{4c} \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \gamma}\right) F(-i\gamma, \eta) d\gamma d\eta$$

onde $M(\gamma, \eta; q, p)$ é o kernel mapeador e $F(-i\gamma, \eta)$ é o kernel de energia do MCG, definido por $h(q, q') = \eta(q, q') F(q, q')$

Nossos resultados e comparações são apresentados a seguir.

2.2.1) Potencial e Inverso da Massa

a) Hélio 4

$$\rho_0(\vec{r}) = \frac{2}{a_0^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \exp\left(\frac{-r^2}{a_0^2}\right)$$

$$\tau_0(\vec{r}) = \frac{2r^2}{a_0^7 \pi^{\frac{5}{2}}} \exp\left(\frac{-r^2}{a_0^2}\right)$$

$$a_0 = 1.57$$

$$\frac{1}{\mu(q)} = 1 + 0.238 \exp\left(\frac{-q^2}{2}\right) \quad (48)$$

$$\frac{1}{M(x)} = 1 + 0.337 \exp(-x^2) \quad (49)$$

$$v(q) = (-3.26q^2 - 74.97) \exp\left(\frac{-q^2}{2}\right) + 23.21 \exp\left(\frac{-2q^2}{3}\right) + 51.76 \quad (50)$$

$$V(x) = (-18.45x^2 - 102.82) \exp(-x^2) + 40.2 \exp(-2x^2) + 47.57 \quad (51)$$

Nas páginas seguintes, temos os gráficos correspondentes às equações apresentadas acima. O gráfico 1 mostra os inversos das massas calculados pelo MSC e MCG, em unidades de massa reduzida. O gráfico 2 mostra a diferença entre esses inversos, também em unidades de massa reduzida. O gráfico 3 traz os potenciais do MSC e MCG.

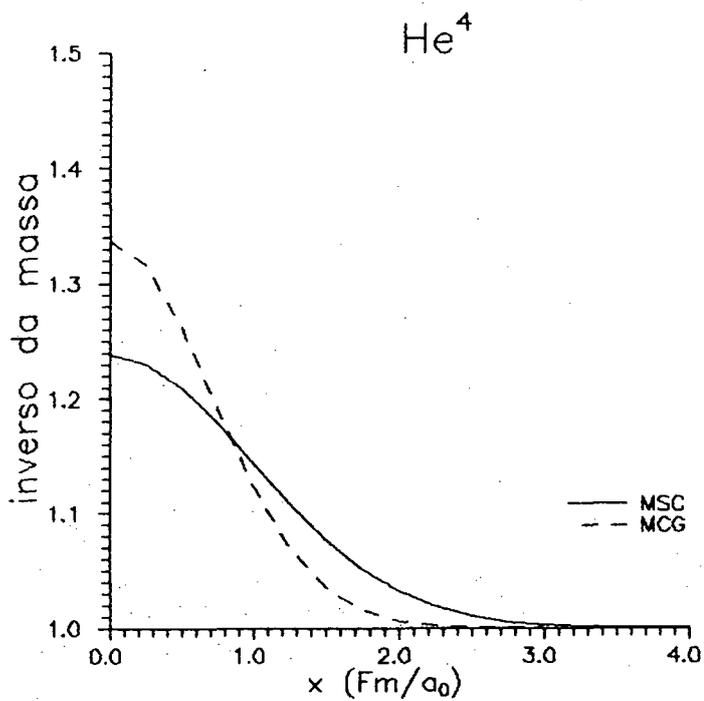


Gráfico 1

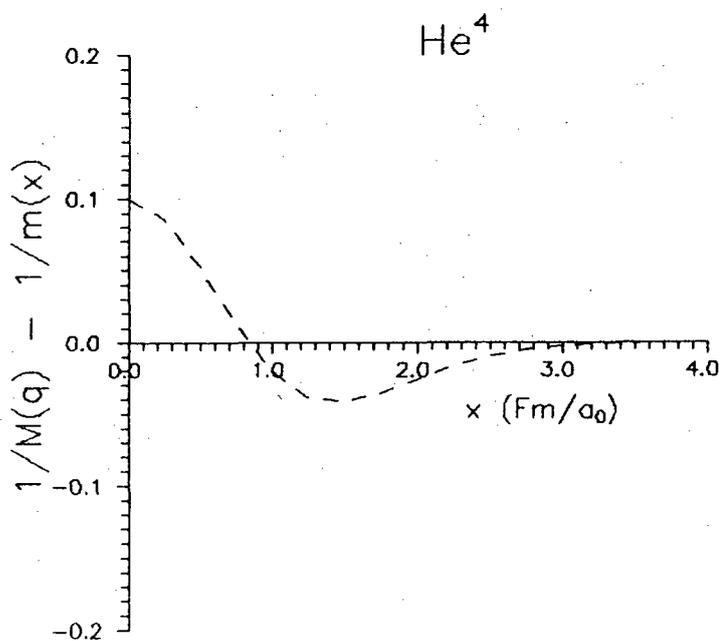
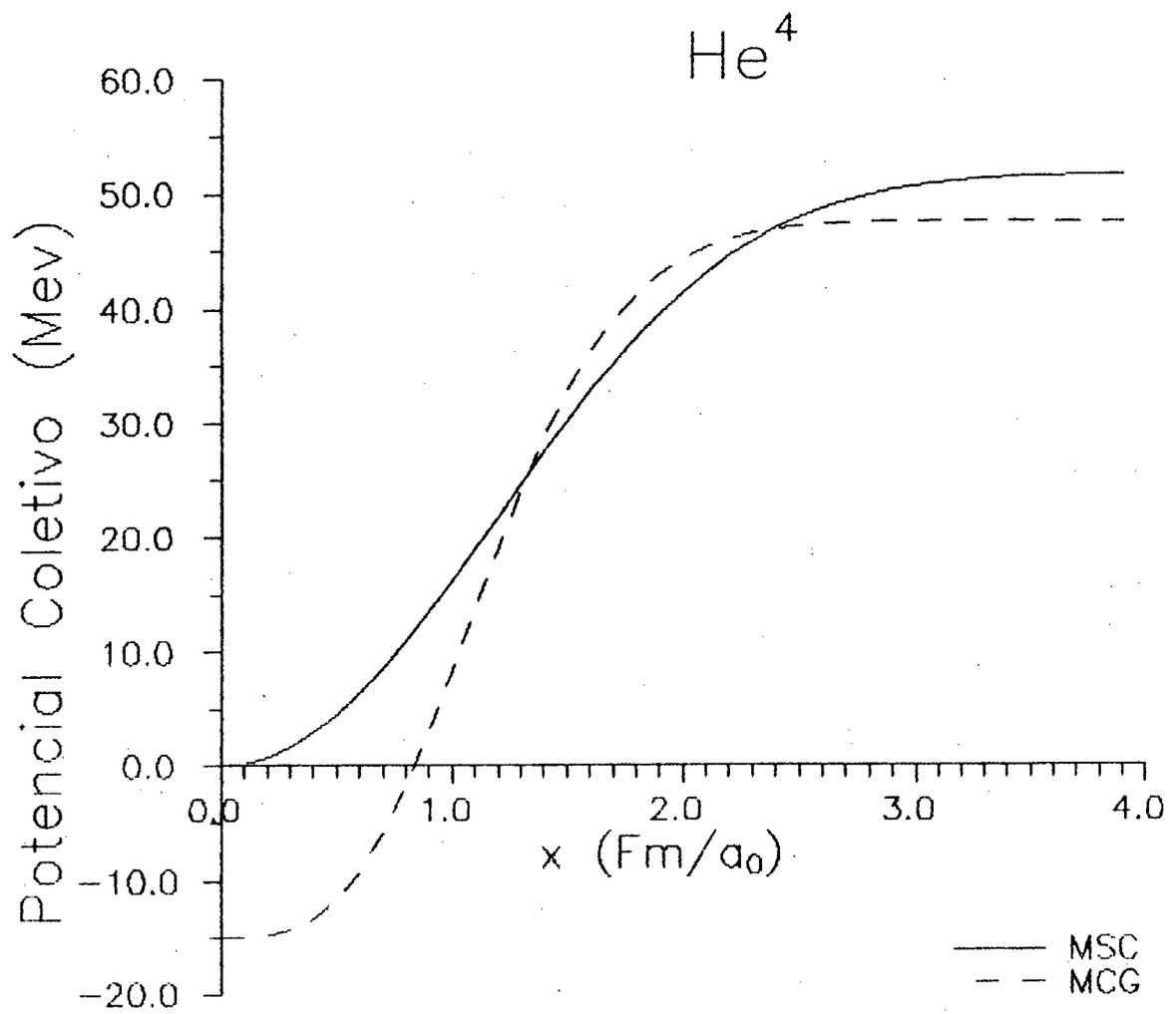


Gráfico 2

**Gráfico 3**

b) Oxigênio 16

$$\rho_0(\vec{r}) = \frac{2}{a_0^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \left[1 + \frac{2}{a_0^2} \vec{r}^2 \right] \exp\left(\frac{-\vec{r}^2}{a_0^2}\right)$$

$$\tau_0(\vec{r}) = \frac{2}{a_0^5 \pi^{\frac{5}{2}}} \left[6 - \frac{3}{a_0^2} \vec{r}^2 + \frac{2}{a_0^4} \vec{r}^4 \right] \exp\left(\frac{-\vec{r}^2}{a_0^2}\right)$$

$$a_0 = 1.72$$

$$\frac{1}{\mu(q)} = 1 + (0.0113q^4 + 0.068q^2 + 0.35) \exp\left(\frac{-q^2}{2}\right) \quad (52)$$

$$\frac{1}{M(x)} = 1 + (0.0206x^4 + 0.0814x^2 + 0.366) \exp\left(\frac{-4x^2}{7}\right) \quad (53)$$

$$\begin{aligned} v(q) = & 283.987 + \\ & (-0.5167q^6 - 13.72q^4 - 98.68q^2 - 457.01) \\ & \exp\left(\frac{-q^2}{2}\right) + \\ & (0.589q^6 + 11.93q^4 + 51.7077q^2 + 173.022) \\ & \exp\left(\frac{-2q^2}{3}\right) \end{aligned} \quad (54)$$

$$\begin{aligned} V(x) = & 280.5 + \\ & (-1.231x^6 - 23.0767x^4 - 122.3137x^2 - 475.6437) \\ & \exp\left(\frac{-4x^2}{7}\right) + \\ & (1.9274x^6 + 24.0933x^4 + 65.566x^2 + 181.889) \\ & \exp\left(\frac{-4x^2}{5}\right) \end{aligned} \quad (55)$$

Na referência 4, a expressão para o potencial coletivo da RGD, no O^{16} é

$$\begin{aligned}
 V(x) = & 140.14 + \\
 & (-1.10x^6 - 21.83x^4 - 113.97x^2 - 446.22) \\
 & \exp\left(\frac{-4x^2}{7}\right) + \\
 & (1.68x^6 + 20.99x^4 + 57.12x^2 + 158.45) \\
 & \exp\left(\frac{-4x^2}{5}\right)
 \end{aligned} \tag{56}$$

Nas páginas seguintes, temos os gráficos referentes aos potenciais e inversos das massas do O^{16} . O gráfico 4 mostra o inverso da massa, calculado pelo MSC e pelo MCG. O gráfico 5 mostra a diferença entre os inversos das massas apresentados anteriormente. No gráfico 6, vemos os potenciais do MSC e do MCG. O gráfico 7 traz a comparação entre os potenciais do método da transformada de Weyl (MTW), aplicado por Galetti, e do MCG. Nesse gráfico, fixamos o mesmo padrão de energia para ambos os potenciais (55 e 56).

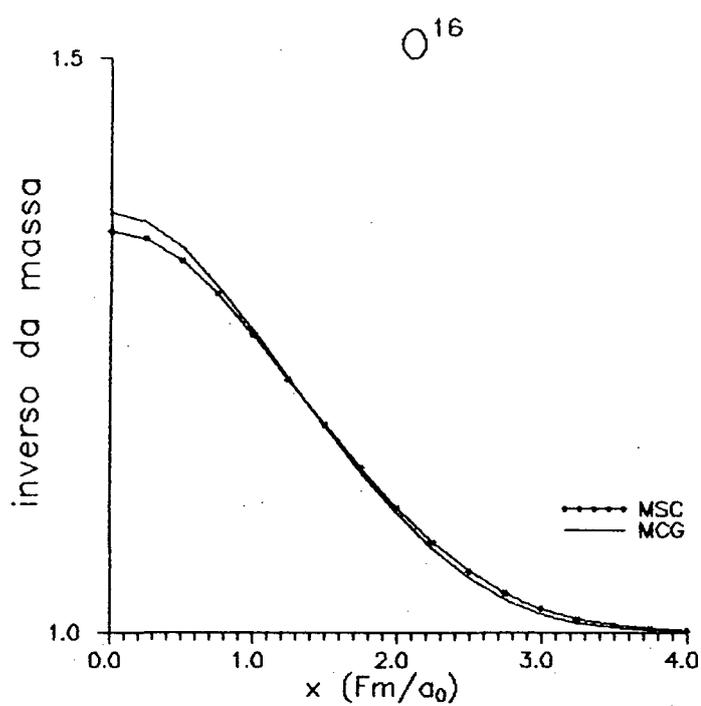


Gráfico 4

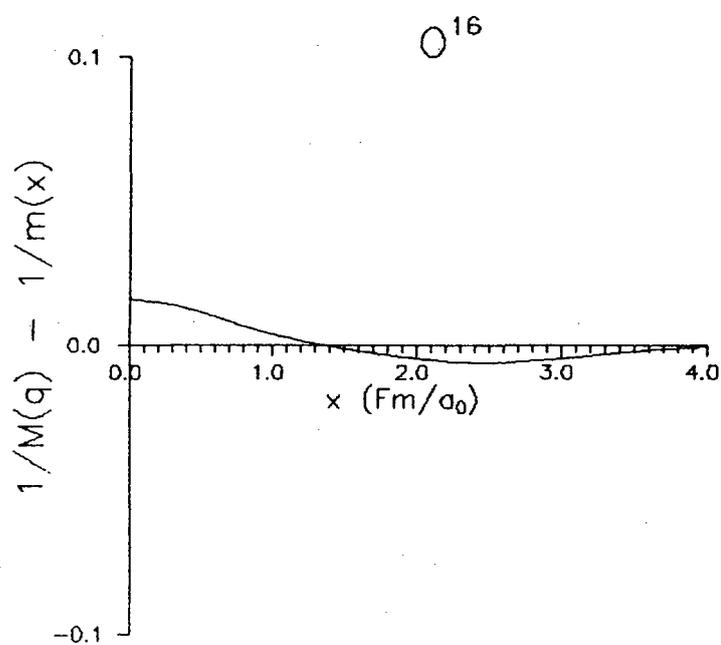


Gráfico 5

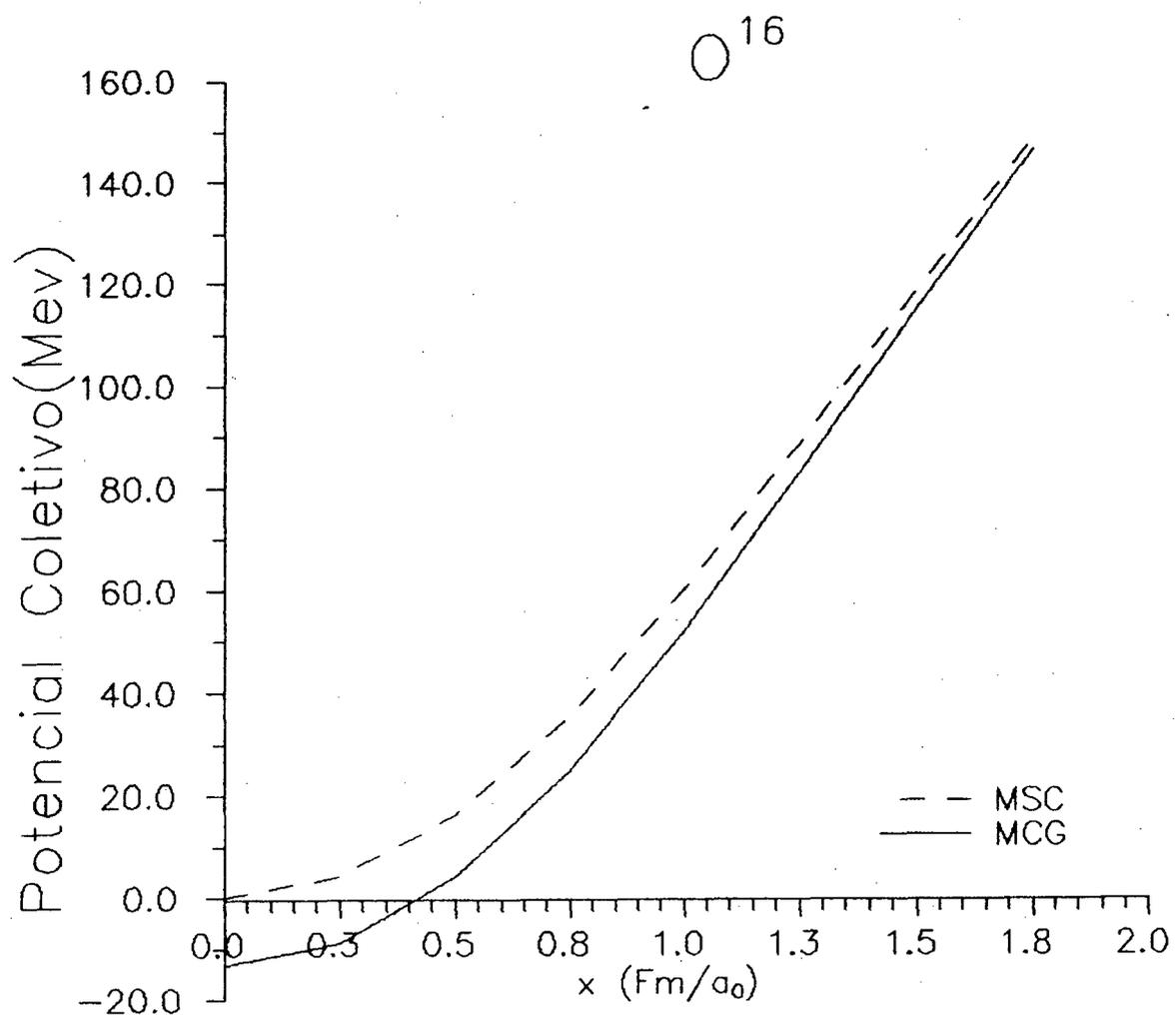


Gráfico 6

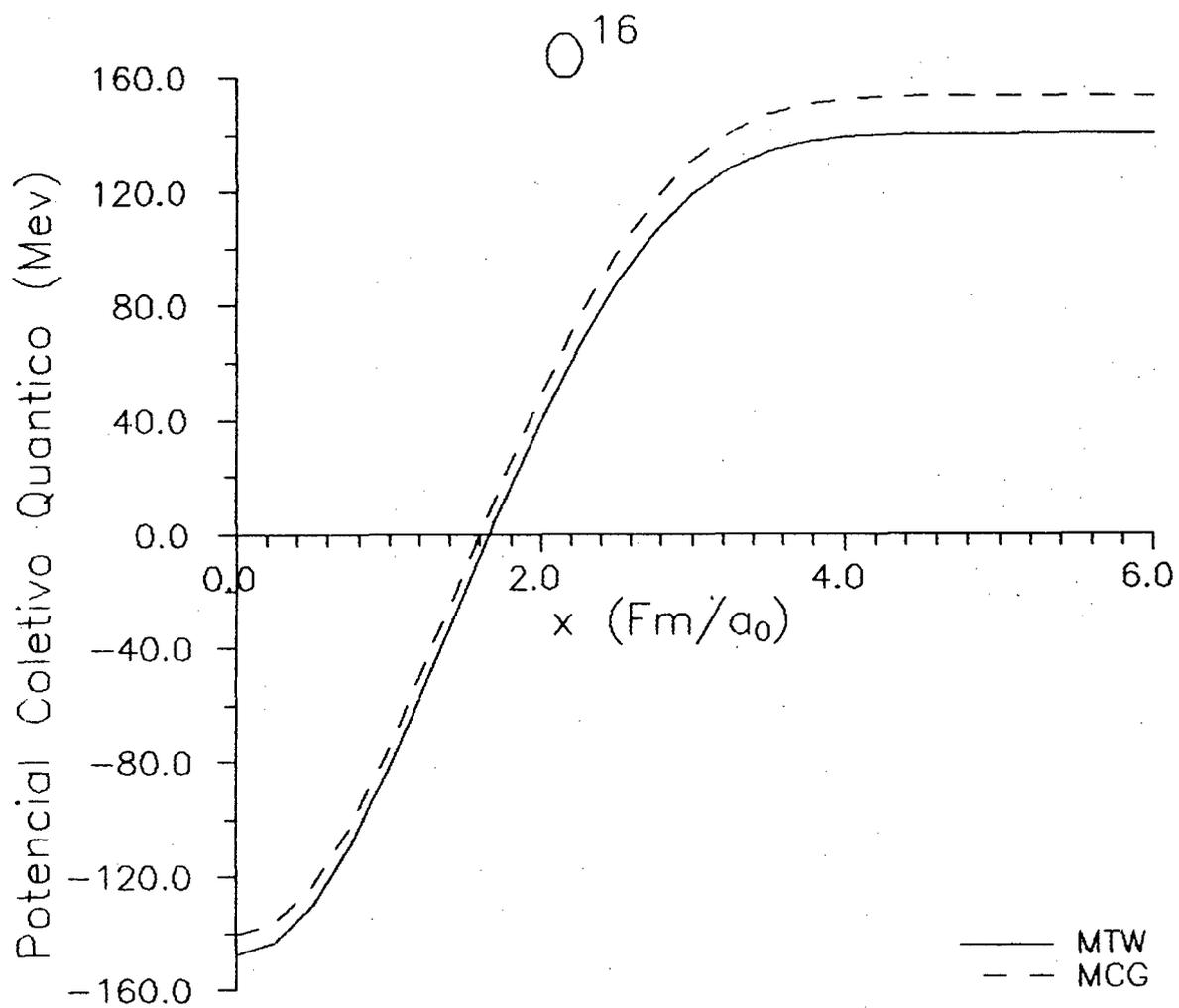


Gráfico 7

c) Cálculo 40

$$\rho_0(\vec{r}) = \frac{1}{a_0^3 \pi^{\frac{3}{2}}} \left[5 + \frac{4}{a_0^4} r^4 \right] \exp\left(\frac{-r^2}{a_0^2}\right)$$

$$\tau_0(\vec{r}) = \frac{1}{a_0^5 \pi^{\frac{5}{2}}} \left[12 + \frac{37}{a_0^2} r^2 - \frac{16}{a_0^4} r^4 + \frac{4}{a_0^6} r^6 \right] \exp\left(\frac{-r^2}{a_0^2}\right)$$

$$a_0 = 1.96$$

$$\frac{1}{\mu(q)} = 1 + (0.0002q^8 + 0.00076q^6 + 0.0187q^4 + 0.1034q^2 + 0.372) \exp\left(\frac{-q^2}{2}\right) \quad (57)$$

$$\frac{1}{M(x)} = 1 + (0.0003x^8 + 0.00067x^6 + 0.023x^4 + 0.111x^2 + 0.3767) \exp\left(\frac{-10x^2}{19}\right) \quad (58)$$

$$\begin{aligned}
v(q) = & 770.6789 + \\
& (-0.0168q^{10} - 0.4458q^8 - 4.39q^6 - 59.95q^4 - 357.96q^2 \\
& - 1238.44)\exp\left(\frac{-q^2}{2}\right) + \\
& (0.00147q^{12} + 0.0498q^{10} + 0.67q^8 + 4.216q^6 + 49.0467q^4 \\
& + 193.765q^2 + 467.76)\exp\left(\frac{-2q^2}{3}\right)
\end{aligned} \tag{59}$$

$$\begin{aligned}
V(x) = & 767.99 + \\
& (-0.0288x^{10} - 0.63x^8 - 5.2575x^6 - 71.526x^4 - 386.3076x^2 \\
& - 1252.796)\exp\left(\frac{-10x^2}{19}\right) + \\
& (0.0035x^{12} + 0.092x^{10} + 1.00x^8 + 5.164x^6 + 62.8x^4 \\
& + 212.106x^2 + 473.86)\exp\left(\frac{-5x^2}{7}\right)
\end{aligned} \tag{60}$$

Os gráficos referentes às massas e potenciais do Ca^{40} são os gráficos 8 (inversos das massas), 9 (diferença entre os inversos das massas) e 10 (potenciais do MSC e MCG).

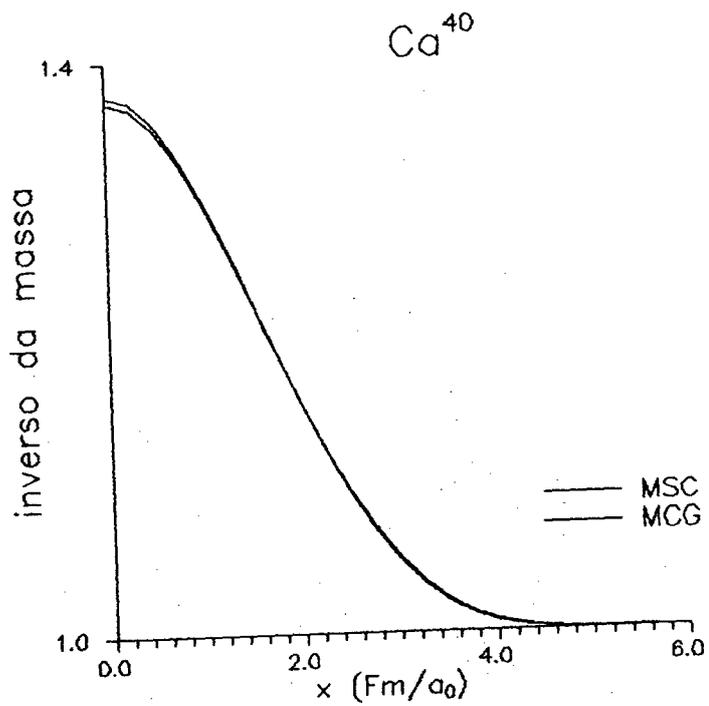


Gráfico 8

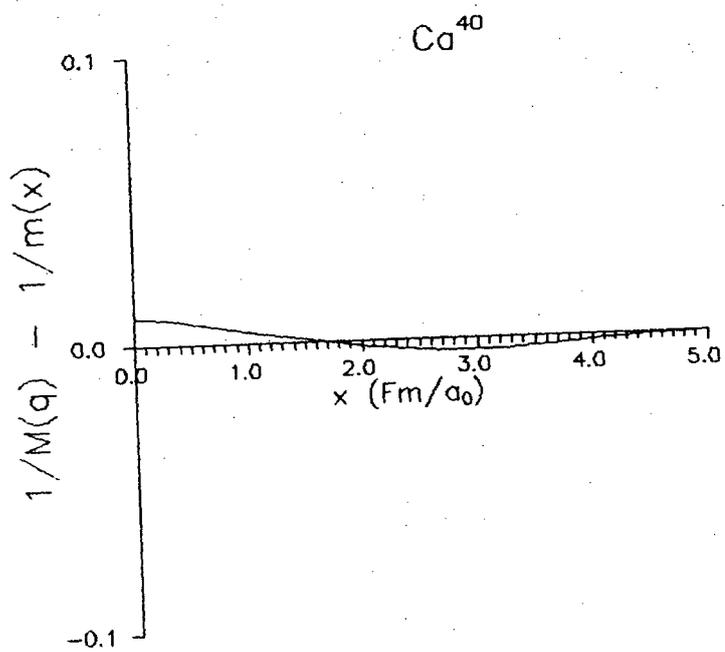


Gráfico 9

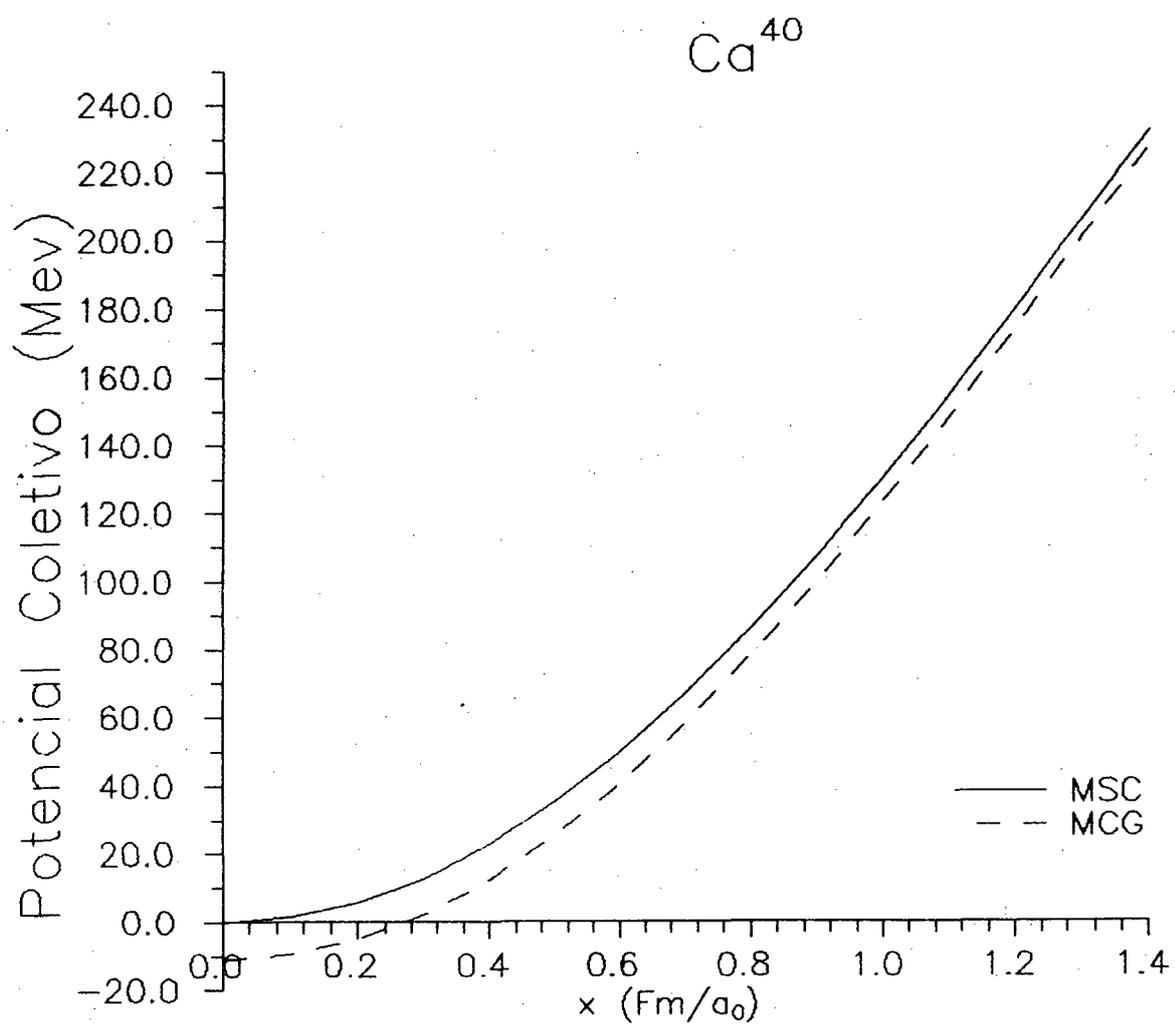


Gráfico 10

No capítulo I, vimos que a diferença entre os potenciais de MSC e MCG é a energia de ponto zero. Calculamos a E_{pz} para os núcleos He^4 , O^{16} e Ca^{40} , com os potenciais obtidos.

Vemos, no gráfico 11, as energias de ponto zero assim calculadas.

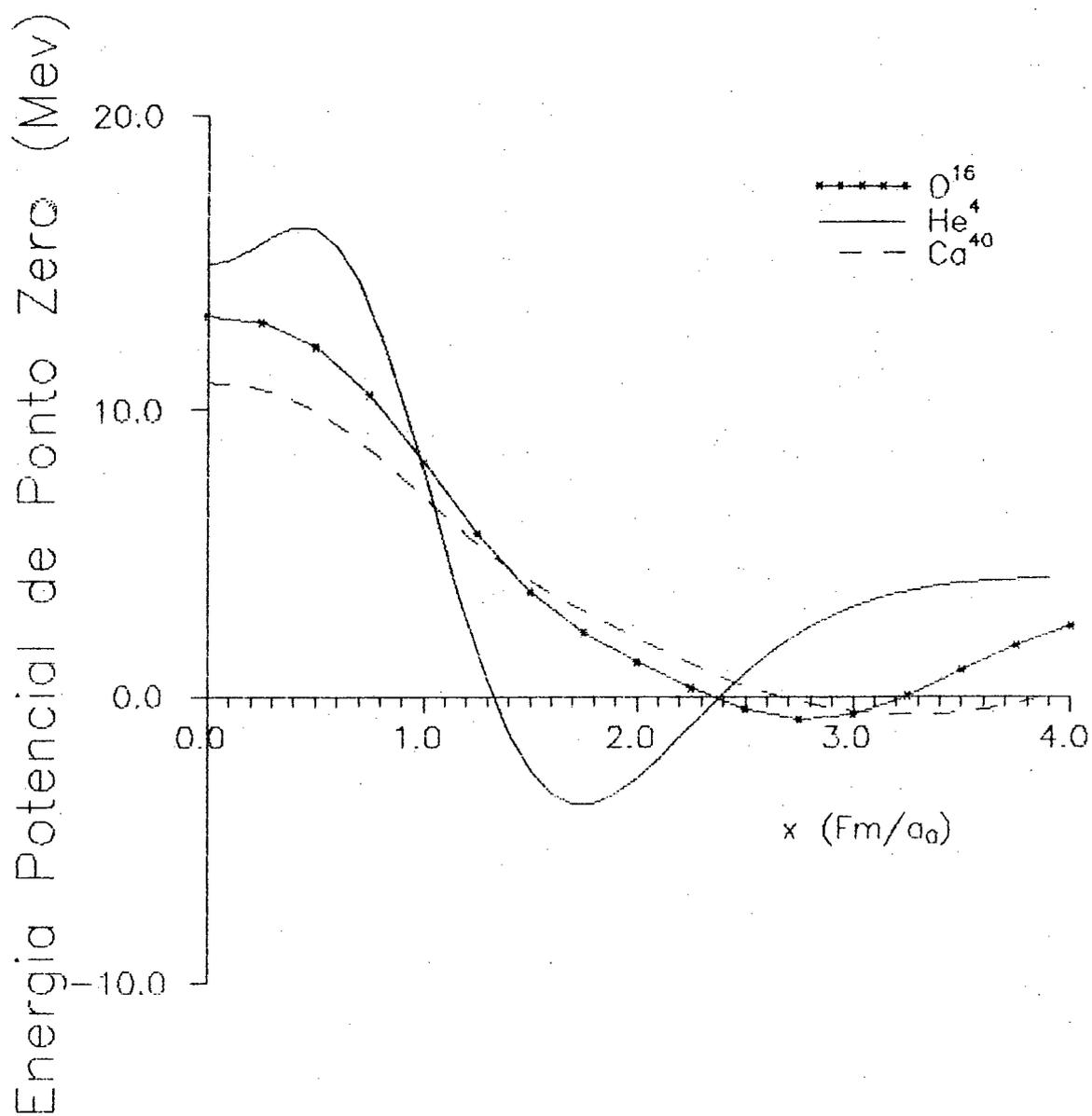


Gráfico 11

Os módulos de incompressibilidade para o potencial coletivo do MCG

$$k = \frac{1}{A} \frac{d^2}{dx^2} V(x)|_{x=0}$$

e para o potencial coletivo do MSC, k' (definido da mesma maneira), são mostrados na tabela 1.

Podemos ver, também, na tabela 1, os fatores de enhancement⁽⁸⁾ obtidos no MCG e no MSC ϵ' , definidos como

$$\epsilon(q)|_{q=0} = \left(\frac{2\mu}{\hbar^2} \right) \left(\frac{1}{2} \right) \langle q | |\hat{Q}, |\hat{V}, \hat{Q}|| | q \rangle |_{q=0}$$

Nas expressões para o inverso da massa, no MSC, o fator de enhancement pode ser identificado através da seguinte definição

$$\frac{1}{\mu(q)} = \frac{1 + \epsilon(q)}{\mu}$$

e de maneira análoga para o MCG.

Tabela 1

Núcleo	k'	k	ϵ'	ϵ
He ⁴	3.80	0.80	0.24	0.33
O ¹⁶	2.79	2.93	0.35	0.36
Ca ⁴⁰	1.86	1.90	0.37	0.37

Na tabela abaixo estão os valores para k e ϵ apresentados na referência 3. Esses valores foram obtidos numericamente por Flocard-Vautherin, pelo Método de Coordenadas Geradoras.

Núcleo	k	ϵ
He ⁴	3.8	0.24
O ¹⁶	2.64	0.33
Ca ⁴⁰	1.74	0.37

2.2.2. Autovalores e Autovetores

Os autovalores e autovetores apresentados nesta seção foram obtidos numericamente. Esta foi a única etapa de nosso trabalho em que usamos cálculo numérico. É, portanto, a única etapa em que as aproximações numéricas poderiam, de alguma maneira, influenciar os resultados.

Os elementos de matriz das Hamiltonianas quânticas foram calculados para função de onda de oscilador harmônico coletivo. A matriz assim obtida foi diagonalizada. A dimensão da matriz foi aumentada até obtermos convergência na segunda casa decimal para as energias do estado fundamental e 1º estado excitado para o He^4 e para as energias do estado fundamental e 1º e 2º estados excitados para O^{16} e Ca^{40} . A convergência foi obtida, para estes 3 núcleos com matrizes de dimensão 3×3 a 11×11 .

É interessante observar que, para o núcleo de Ca^{40} , devido à maior harmonicidade do potencial coletivo os valores de energia estabilizaram-se até o sexto estado excitado, para uma base de 11 funções de onda de oscilador, enquanto que, para os outros dois núcleos, a estabilização foi obtida apenas até o primeiro (He^4) e segundo (O^{16}) estados excitados. Apresentamos os autovalores do 3º ao 6º estados excitados do Cálcio na página 40.

As tabelas 2 e 3 mostram os dois primeiros autovalores das Hamiltonianas do MCG e do MSC para os três núcleos estudados.

Tabela 2
Autovalores da Hamiltoniana do MSC

	He^4	O^{16}	Ca^{40}
ef	12.56	12.33	10.32
1º	34.52	33.09	25.06
2º		64.14	56.41

Tabela 3
Autovalores da Hamiltoniana do MCG

	He^4	O^{16}	Ca^{40}
ef	-0.72	-0.429	-0.4490
1º	26.91	20.477	14.02
2º		53.79	46.78

Autovalores do $C\alpha^{40}$ (do 3^o ao 6^o estado excitado, nessa ordem)

MSC: 89.97, 127.71, 179.74, 234.71

MCG: 74.05, 123.42, 139.37, 229.67

A diferença, em MEV, $E_1 - E_0$ é 27.63 para He^4 , 20.90 para O^{16} e 14.47 para Ca^{40} . Os resultados obtidos por Flocard-Vautherin para $E_1 - E_0$ são 27.01, 24.30 e 20.0 .

As diferenças, em MEV, entre os autovalores da hamiltoniana do MCG da RGD para o núcleo de Cálcio, são apresentadas abaixo, até o 6^o estado excitado.

$$E_1 - E_0 = 14.47$$

$$E_2 - E_1 = 32.76$$

$$E_3 - E_2 = 27.27$$

$$E_4 - E_3 = 49.42$$

$$E_5 - E_4 = 15.95$$

$$E_6 - E_5 = 90.3$$

As tabelas 4 e 5 mostram os coeficientes das funções de onda do estado fundamental (ef) e do primeiro estado excitado de oscilador harmônico coletivo nas funções de onda do estado fundamental Φ_0 e do primeiro estado excitado Φ_1 da vibração de dipolo.

Tabela 4
Autovetores da Hamiltoniana do MCG

Φ_n^{oh}	He^4		O^{16}		Ca^{40}	
	Φ_0	Φ_1	Φ_0	Φ_1	Φ_0	Φ_1
ϕ_0	-0.99	0.00	0.99	0.00	-0.99	0.00
ϕ_1	0.00	-0.97	0.00	0.96	0.00	0.94
ϕ_2	0.11	0.00	-0.08	0.00	0.09	0.00
ϕ_3	0.00	0.19	0.00	-0.27	0.00	0.31

Tabela 5
Autovetores da Hamiltoniana do MSC

Φ_n^{oh}	He^4		O^{16}		Ca^{40}	
	Φ_0	Φ_1	Φ_0	Φ_1	Φ_0	Φ_1
ϕ_0	0.99	0.00	-0.99	0.00	-0.99	0.00
ϕ_1	0.00	0.99	0.00	0.96	0.00	-0.95
ϕ_2	-0.03	0.00	0.07	0.00	0.08	0.00
ϕ_3	0.00	0.002	0.00	-0.25	0.00	0.29

As funções de onda obtidas para o núcleo de He^4 são apresentadas nos gráficos 12 (MSC) e 13(MCG). As funções de onda do O^{16} encontram-se nos gráficos 14 e 15. As funções de onda de Ca^{40} estão apresentadas nos gráficos 16 e 17.

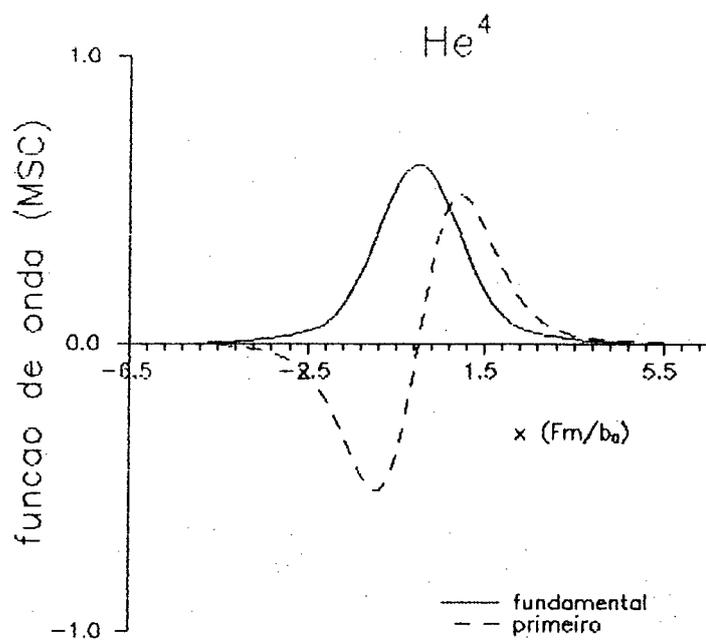


Gráfico 12

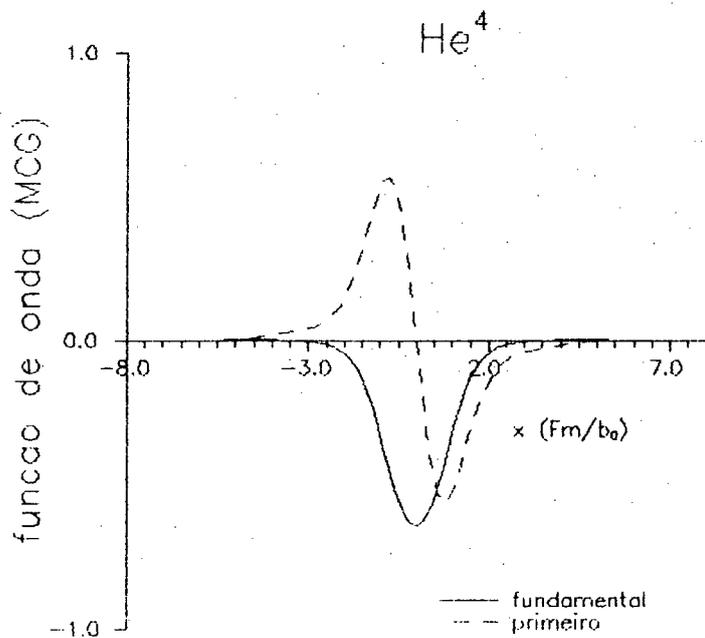


Gráfico 13

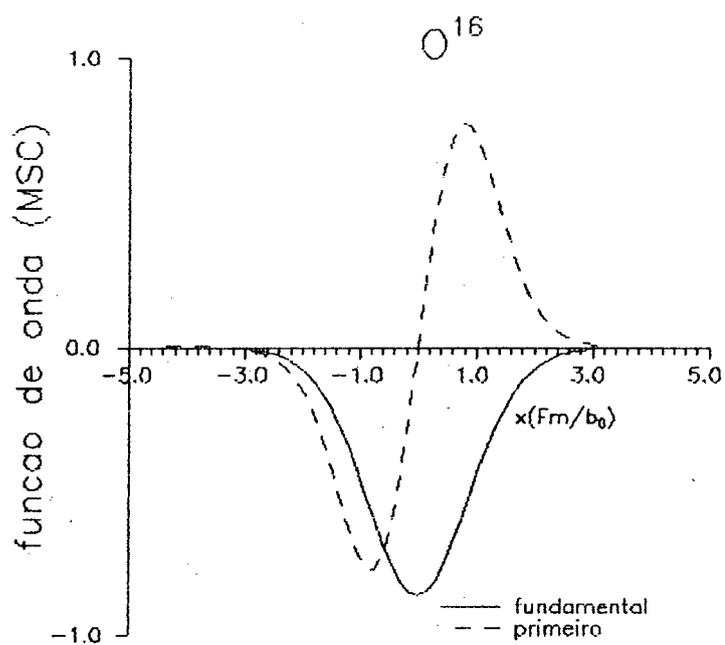


Gráfico 14

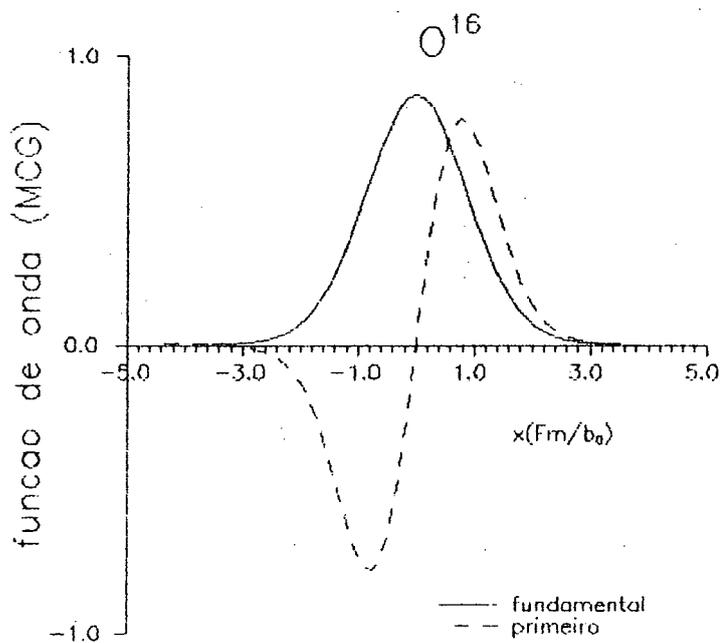


Gráfico 15

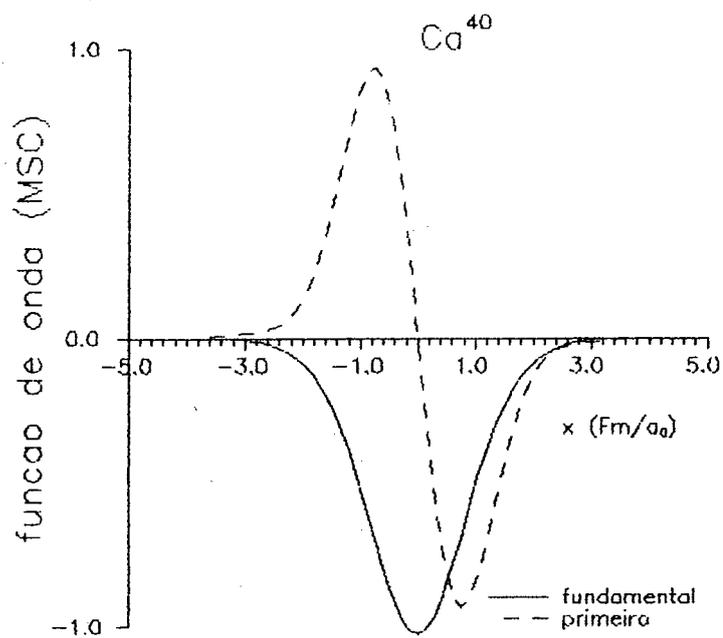


Gráfico 16

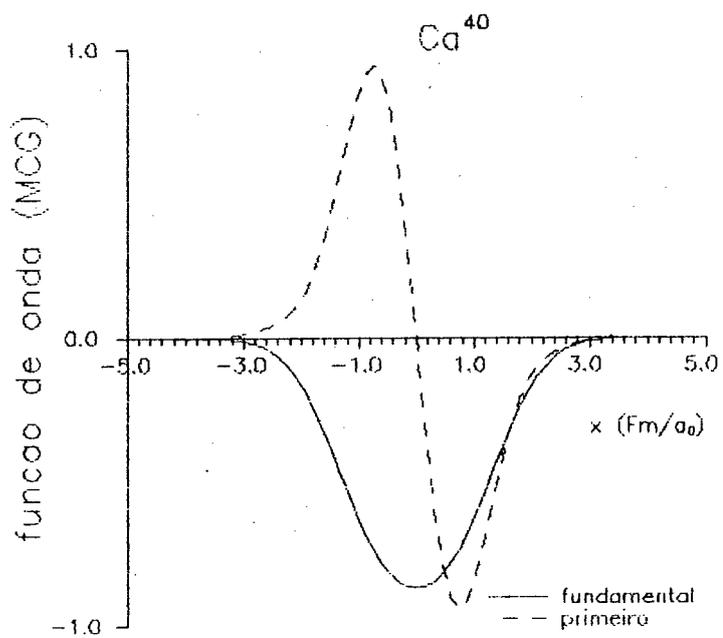


Gráfico 17

2.3. Comentários

Nas seções anteriores, apresentamos as expressões das hamiltonianas coletivas obtidas através do Método Semiclássico e do Método de Coordenadas Geradoras, bem como as expressões dos inversos das massas, também calculados pelos dois métodos.

Antes de apresentarmos nossas conclusões, faremos alguns comentários a respeito dos resultados obtidos nos cálculos que envolvem as expressões citadas acima.

Um de nossos objetivos, neste trabalho, era, através do estudo dos potenciais coletivos, comprovar os efeitos originados pela energia de ponto zero.

No que se refere aos potenciais coletivos, os efeitos da Epz ficam claros, tanto nos gráficos de comparação dos potenciais (3,6,9), quanto no gráfico 11, onde estão plotadas as Energias Potenciais de Ponto Zero.

Como já havia sido observado na referência 8, há uma total discordância entre os potenciais de MSC e MCG para o núcleo He^4 . A discordância entre esses potenciais, nos núcleos O^{16} e Ca^{40} , também é visível. Entretanto, podemos observar que esse efeito da Epz é muito menor no O^{16} e no Ca^{40} do que no He^4 . Portanto, há uma sugestão de que os efeitos da Epz diminuem, à medida que aumenta o número de nucleons A.

Mais informações a respeito dos efeitos de Epz são obtidos na comparação das constantes de incompressibilidade dos potenciais do MSC e MCG (k e k'). Vemos, na tabela I, que, enquanto para o He^4 essas constantes têm valores muito diferentes, para o O^{16} a diferença entre elas é relativamente pequena e, para o Ca^{40} , é ainda menor.

Uma maior concordância entre as expressões do MSC e MCG para núcleos mais pesados fica nítida nos inversos das massas. Enquanto para o He^4 a diferença entre essas grandezas é apreciável (gráfico 2), no O^{16} é pequena (gráficos 4 e 5) e no Ca^{40} é mínima (gráficos 8 e 9). Os fatores de enhancement ϵ e ϵ' , apresentados na tabela I, reforçam essa observação, pois seus valores mostram concordância mínima para o He^4 , melhor para o O^{16} e total para o Ca^{40} .

Os valores de Epz em $x=0$, para os três núcleos estudados, são: $-15.05(He^4)$, $-13.25(O^{16})$ e $-10.94(Ca^{40})$. Portanto, também esse valor diminui sensivelmente para o Ca^{40} em relação ao He^4 .

Também os autovalores das hamiltonianas de MSC e MCG tendem a uma maior concordância para o Ca^{40} do que para O^{16} e para O^{16} do que para o He^4 , no estado fundamental e 1^o estado excitado.

Ainda focalizando os efeitos da Epz, vemos, nas tabelas 4 e 5, os coeficientes para as funções de onda coletivas. Os coeficientes do MSC e MCG têm pouca concordância para o He^4 , maior concordância para o O^{16} e ótima concordância para o Ca^{40} . Os

gráficos das funções de onda mostram-nos poucas diferenças entre os estados calculados pelo MSC e pelo MCG, diferenças que se tornam mínimas para o Ca^{40} .

Compararemos, agora, os resultados por nós obtidos através do MCG, com os resultados obtidos por outros autores.

Observando o gráfico 7, vemos que há uma pequena diferença entre nosso potencial coletivo do MCG e o potencial obtido por Galetti. Para confirmar essa observação, podemos comparar a constante de incompressibilidade obtida por Galetti com a que apresentamos na tabela 1, para o O^{16} . Não há aproximações na obtenção desses dois potenciais. Portanto, não esperávamos que houvesse diferenças consideráveis entre eles. Não está clara, para nós, a origem dessas diferenças. Ela poderá ser objeto de futuras investigações.

Comparando nossos resultados com os de Flocard-Vautherin, percebemos pequenas diferenças e algumas coincidências, no que diz respeito aos fatores de enhancement e módulos de incompressibilidade. Vemos que há uma maior concordância entre os dados desses autores e os que obtivemos pelo MSC. Isto é compreensível, considerando-se que essas grandezas são calculadas, em Flocard-Vautherin, através das coordenadas geradoras, γ e γ' , procedimento que, no nosso caso, foi usado no MSC. Já ao aplicarmos o MCG, fizemos os cálculos de k e ϵ utilizando a coordenada coletiva x , obtida de maneira exata. Quanto aos intervalos de energia entre o estado fundamental e o 1° estado excitado, $\Delta E = E_1 - E_0$, vemos que nosso resultado para o He^4 está muito próximo do resultado obtido por Flocard e Vautherin. Já para o O^{16} e Ca^{40} , nossos resultados e o desses autores apresentam diferenças consideráveis (em torno de 5 Mev). Devemos lembrar, porém, que, em nosso trabalho, há só uma etapa realizada numericamente (diagonalização das hamiltonianas), a última. Já Flocard e Vautherin utilizam um método que envolve, desde o seu início, várias aproximações numéricas.

Flocard e Vautherin observaram coincidência entre seus resultados e os dados experimentais. Poderemos, futuramente, realizar tal comparação, lembrando, porém, que ela é bastante delicada, pois as ressonâncias apresentam larguras, devido ao acoplamento com outros modos de excitação.

A forma dos potenciais obtidos também pode ser estudada.

Para o He^4 , o potencial do MCG lembra um poço quadrado, enquanto que o do MSC lembra, remotamente, um potencial degrau. Já para o O^{16} , as formas dos potenciais do MSC e MCG se aproximam de um oscilador harmônico. A tendência a um potencial harmônico aumenta para o Cálcio. Nesse último caso, notamos, ainda, que as energias do espectro estabilizam-se rapidamente para uma base de oscilador

harmônico.

Entretanto, um estudo mais cuidadoso dos espectros afasta, completamente, a possibilidade de harmonicidade nos potenciais como um todo, já que as energias dos espectros não apresentam intervalos regulares (observem-se os intervalos de energia calculados para o Ca^{40}).

Geralmente, os estudos da RGD envolvem as transições entre o estado fundamental e o primeiro estado excitado. Vemos, nessa faixa, que a RGD está muito próxima de um oscilador harmônico (ver tabelas 4 e 5).

Conclusões

Os dois métodos utilizados nesse trabalho partem de um operador coletivo atuando no estado fundamental do núcleo e de uma hamiltoniana microscópica. Esse operador coletivo descreve um tipo de movimento que o sistema executa.

Vimos que é possível construir analiticamente, através desses métodos, expressões para hamiltonianas coletivas nucleares.

Com as hamiltonianas coletivas podemos, então, obter outras características do modo coletivo do sistema, como o módulo de incompressibilidade, o fator de enhancement na massa, os espectros e autovetores.

Aplicamos, aqui, essa teoria ao estudo da Ressonância Gigante de Dipolo nos núcleos He^4 , O^{16} e Ca^{40} . Foi possível, então, comparar nosso método com outros métodos já utilizados. Concluimos que os métodos Semiclássico e de Coordenadas Geradoras, da maneira como os empregamos, levam a bons resultados.

Também comparamos os dados obtidos pelo MSC e MCG e vimos que os efeitos da energia de ponto zero não são desprezíveis. Afastamos, portanto, a possibilidade de total coincidência entre o Método Semiclássico e o Método de Coordenadas Geradoras.

Os resultados demonstram claramente os efeitos da energia de ponto zero sobre as características coletivas do sistema:

- . os potenciais e os inversos das massas têm formas diferentes para o MSC e para o MCG
- . também são diferentes os módulos de incompressibilidade, os fatores de enhancement, os autovetores e os espectros obtidos no MSC e no MCG.

Entretanto, fica evidente uma diminuição de todas essas diferenças, juntamente com a diminuição da energia de ponto zero em $x = 0$, à medida que aumenta o número de nucleons. Há uma expectativa de que essas diferenças desapareçam para núcleos pesados.

O cálculo que realizamos para os núcleos leves He^4 , O^{16} e Ca^{40} podem tornar-se inviáveis, do ponto de vista do tempo computacional, para núcleos mais pesados. Acreditamos, entretanto, que algumas modificações podem ser feitas nos programas, de maneira a aumentar a faixa do número de massa A em que o cálculo é realizável.

Apêndice 1

Cálculo dos Potenciais Coletivos-Programa em Reduce

OFF NAT\$

 COMMENT ESTE PROGRAMA CALCULA AS INTEGRAIS DA EXPRESSÃO (36).
 CADA DENSIDADE CONTÉM UMA POTÊNCIA DE R E UMA EXPONENCIAL.
 PORTANTO, CADA TERMO A SER INTEGRADO TEM UMA POTÊNCIA
 DE R E UMA EXPONENCIAL PRODUTO DE DUAS OUTRAS. INTEGRAMOS
 ESTA EXPONENCIAL TRANSFORMANDO SEU ARGUMENTO EM UM
 QUADRADO PERFEITO.

EXPONENCIAIS DAS INTEGRAIS DO PRIMEIRO TIPO

(as seis primeiras integrais da expressão (36) são do primeiro tipo)

$$\exp[-(X ** 2 + Y ** 2 + Z ** 2) * \beta ** 2] * \exp\left\{-[(\vec{R} + \vec{Q}) ** 2] * \beta ** 2\right\}$$

TRANSFORMANDO O ARGUMENTO, TEREMOS

$$\begin{aligned} & \exp[-2 * (X ** 2 + Y ** 2) * \beta ** 2)] * \\ & \exp\{-2 * [(Z + (Q/2)) ** 2] * \beta ** 2\} * \\ & \exp[-((Q * \beta) ** 2)/2] \end{aligned}$$

O ARGUMENTO DA EXPONENCIAL QUE DEVE SER MULTIPLICADA
 PARA TRANSFORMAR O ARGUMENTO É CHAMADO, NO PROGRAMA,
 "D". O FATOR QUE MULTIPLICA O TERMO EM X E Y, NO
 ARGUMENTO DA PRIMEIRA EXPONENCIAL NA EXPRESSÃO ANTERIOR,
 É CHAMADO "NN". NO ARGUMENTO DA EXPONENCIAL EM "Z",
 O FATOR QUE MULTIPLICA "Q", DENTRO DOS PARÊNTESES,
 É CHAMADO "F".

INTEGRAIS DO SEGUNDO TIPO

(as duas últimas integrais da expressão (36) são do segundo tipo)

$$\exp[-(X ** 2 + Y ** 2 + Z ** 2) * \beta ** 2] * \left\{ \exp\left\{-[(\vec{R} + \vec{Q}) ** 2] * \beta ** 2\right\} \right\} ** 2$$

TRANSFORMANDO O ARGUMENTO, TEREMOS

$$\exp[-3 * (X ** 2 + Y ** 2) * \beta ** 2)] * \\ \exp\{-3 * [(Z + (2 * Q/3)) ** 2] * \beta ** 2\} * \\ \exp[-2 * ((Q * \beta) ** 2)/3]$$

O ARGUMENTO DA EXPONENCIAL QUE DEVE SER MULTIPLICADA PARA TRANSFORMAR O ARGUMENTO É CHAMADO, NO PROGRAMA, "DD". O FATOR QUE MULTIPLICA O TERMO EM X E Y, NO ARGUMENTO DA PRIMEIRA EXPONENCIAL NA EXPRESSÃO ANTERIOR, É CHAMADO "NNN". NO ARGUMENTO DA EXPONENCIAL EM "Z", O FATOR QUE MULTIPLICA "Q", DENTRO DOS PARÊNTESES, É CHAMADO "FF". \$

***** NNN:=3\$

FF:=1/3\$

DD:=(2*Q**2) /3\$

NN:=2\$

F:=1/2\$

D:=(Q**2) /2\$

D1:=D/ (Q**2) \$

DD1:=DD/ (Q**2) \$

COMMENT CALCULA FATORIAL\$

PROCEDURE FACT P\$

BEGIN SCALAR M\$

M:=1\$

L1: IF P=0 THEN RETURN M\$

M:=M*P\$

P:=P-1\$

GO TO L1\$

END\$

COMMENT CALCULA GAMA PARA NÚMEROS FRACIONÁRIOS\$

```

PROCEDURE GAMA XX$
BEGIN SCALAR Y, W, ZZ$
IF XX=1/2 THEN ((Y:=SQRT PI$)) ELSE ((ZZ:=XX- (1/2) $
Y:=(FOR W:=1:ZZ PRODUCT (2*W-1)) * SQRT PI/ (2**ZZ) $))$
RETURN Y$
END$

```

COMMENT UMA VEZ OBTIDA A HAMILTONIANA DO MCS, PODEMOS QUANTIZÁ-LA PARA OBTER A HAMILTONIANA DO MCG. ISTO É FEITO PELA SUB-ROTINA SEGUINTE, A QUAL CALCULA AS INTEGRAIS ENVOLVIDAS NAS EXPRESSÕES (44), (45) E (46), PARA CADA UMA DAS INTEGRAIS DA EXPRESSÃO (36).

```

PROCEDURE QUANT (POL, POLO, GRAU, VAR) $
BEGIN SCALAR CQ1, TCQ, DER$
ARRAY COI 20$
IQ:=(SQRT NA/SQRT (NA-4*VAR)) *E** ((-VAR* (X) **2*NA)/
(N A-4*VAR))$
IF GRAU NEQ 0 THEN ((COEFF (NUM POL, Z, COI) $
FOR LQ:=0:GRAU DO
((CQ1:=COI (LQ) /DEN POL$
IF CQ1 NEQ 0 THEN
((DER:=DF (IQ,VAR,LQ/2) $
TCQ:=TCQ+CQ1* ((-1)** (LQ/2)) *DER$))
ELSE ((TCQ:=TCQ+0$))))))
ELSE ((TCQ:=POLO*IQ))$
CLEAR COI$
RETURN TCQ$
END$

```

COMMENT CALCULA O LAPLACIANO DE UM POLINÔMIO\$

```

PROCEDURE LAPLA ZB$

```

```

BEGIN SCALAR NABL2$
NABL:=RO*DF (ZB, RO) $
NABL2:=((1/RO) *DF (NABL, RO) +DF (ZB,Z,2)) /AZERO**$
RETURN NABL2$
END$

```

```

*****
COMMENT CALCULA AS INTEGRAIS DA EXPRESSÃO (36),
PROPRIAMENTE DITAS. OS DADOS DE ENTRADA SÃO O GRAU DO
POLINÔMIO A SER INTEGRADO (ZA) E O DENOMINADOR DO
POLINÔMIO (ZAA)$

```

```

*****
PROCEDURE INTEGRAL (ZA,ZAA) $
BEGIN SCALAR INT,RES$
FOR L:=0:ZA DO ((CO:=VET (L) /ZAA$
IF CO NEQ 0 THEN
((INT:=INT+ (PI*CO* (FACT(L/2)) / (NN** ((L+2) /2))) $))
ELSE ((INT:=INT+0$)))$
INTE:=SUB (Z=U-F*Q,INT) $
ARRAY VETOR 20$
C2:=DEG (NUM INTE, U) $
COEFF (NUM INTE, U, VETOR) $
FOR LL:=0:C2 DO ((COO:=VETOR (LL) /DEN (INTE) $
IF COO NEQ 0 THEN
((IF DEN (LL/2) =1 THEN
((RES:=RES+ (COO*GAMA ((LL+1) /2) /
(NN** ((LL+1) /2))) $))
ELSE (( RES:=RES+ 0$))))))$
CLEAR VETOR, VET$
RETURN RES$
END$

```

```

*****
COMMENT AS VARIÁVEIS CODEMA0,..., CODECIO,..., SÃO OS
COEFICIENTES DOS POLINÔMIOS DENSIDADE DE PARTÍCULAS E
DENSIDADE DE ENERGIA CINÉTICA, RESPECTIVAMENTE.
NESTE PROGRAMA, DEVEM ENTRAR, NO MÍNIMO,

```

CODEMA0, CODEMA2, CODECI0 E CODECI2.

SE ALGUM DELES FOR NULO, O VALOR ZERO DEVE ENTRAR NA ETAPA DE SUBSTITUIRMOS OS VALORES, COM O COMANDO "SUB".

"NA" É O NÚMERO DE MASSA.

NA:= \$
 CODEMA0:= \$
 CODEMA2:= \$
 CODEMA4:= \$
 CODEMA6:= \$
 CODECI0:= \$
 CODECI2:= \$
 CODECI4:= \$
 CODECI6:= \$

COMMENT OS POLINÔMIOS "A" E "B" REPRESENTAM AS DENSIDADES DE PARTÍCULAS E DE ENERGIA CINÉTICA, RESPECTIVAMENTE. "A" REPRESENTA A DENSIDADE DESLOCADA. ESTES DOIS POLINÔMIOS DEVEM TER, NO MÍNIMO, DOIS TERMOS. COMO JÁ DISSEMOS ANTERIORMENTE, SE UM DOS COEFICIENTES FOR NULO, ISSO SÓ SERÁ CONSIDERADO AO SUBSTITUIRMOS OS COEFICIENTES POR SEUS VALORES. POR EXEMPLO, SE CODEMA2 FOR NULO, ISSO SÓ SERÁ CONSIDERADO NA ETAPA EM QUE TEMOS SUB(A0=CODEMA0,A1=CODEMA2,...,ETC). I1, I2, I3 E I4 SÃO A PRIMEIRA, TERCEIRA, QUINTA E SÉTIMA INTEGRAIS DA EXPRESSÃO (36), NA ORDEM EM QUE ESTA ESTÁ ESCRITA. NO QUE SEGUE, YEXP CORRESPONDE À EXPONENCIAL

$$YEXP = \exp[((q * \beta) ** 2) / 2]$$

A:=A0+A2* (RO**2+ (Z+Q) **2) +
 A4* (RO**2+ (Z+Q) **2) **2\$
 B:=B0+B2* (RO**2+Z**2) +B4* (RO**2+Z**2) **2+
 B6* (RO**2+Z**2) **3\$
 C:=A*B\$

```

C1:=DEG (NUM C, RO) $
ARRAY VET 20$
COEFF (NUM C, RO, VET) $
DC:=DEN C$
RES1:=INTEGRAL (C1, DC) $
I1:=SUB (A0=CODEMA0, A2=CODEMA2, B0=CODEMA0,
        B2=CODEMA2, B4=CODEMA4, A4=CODEMA4,
        B6=CODEMA6, RES1) *AZERO**3/YEXP$
I2:=SUB (A0=CODEMA0, A2=CODEMA2, A4=CODEMA4,
        B0=CODECI0, B2=CODECI2, B4=CODECI4, B6=CODECI6,
        RES1) *AZERO**3/YEXP$
AB:=SUB (Q=0, A) $
BB:=LAPLA (AB*E** (- (RO**2+Z**2))) $
CC:=A*B/ (E** (- (RO**2+Z**2))) $
CC1:=DEG (NUM CC, RO) $
ARRAY VET 20$
COEFF (NUM CC, RO, VET) $
DCC:=DEN CC$
RES3:=INTEGRAL (CC1, DCC) $
I3:=SUB (A0=CODEMA0, A2=CODEMA2, A4=CODEMA4, RES3)
*AZERO/YEXP$
CLEAR NN, F$
NN:=NNN$
F:=FF
PB:=AB**2$
CB:=A*PB$
CB1:=DEG (NUM CB, RO) $
ARRAY VET 20$
COEFF (NUM CB, RO, VET) $
DCB:=DEN CB$
RES2:=INTEGRAL (CB1, DCB) $
I4:=SUB (A0=CODEMA0, A2=CODEMA2, A4=CODEMA4, RES2)
*AZERO**3/ (YEXP** (4/3)) $
I10:=SUB (YEXP=1, Q=0, I1) $
I20:=SUB (YEXP=1, Q=0, I2) $

```

```

I30:=SUB (YEXP=1, Q=0, I3) $
I40:=SUB (YEXP=1, Q=0, I4) $
DELTA:=T0* (1+ (X0/2)) * (I1-I10) +
      (1/2) * (T1+T2) * (I2-I20) +
      (1/8) * (T2-3*T1) * (I3-I30)+
      T3* (I4-I40) /2$
DELT1:=SUB (YEXP=E** (Q**2/2) , DELTA) $
KM:=DF (DELT1, Q, 2) $
I1T:=SUB (Q=Z, YEXP=1, I1) $
I2T:=SUB (Q=Z, YEXP=1, I2) $
I3T:=SUB (Q=Z, YEXP=1, I3) $
I4T:=SUB (Q=Z, YEXP=1, I4) $
DI1T:=DEG (NUM I1T, Z) $
DI2T:=DEG (NUM I2T, Z) $
DI3T:=DEG (NUM I3T, Z) $
DI4T:=DEG (NUM I4T, Z) $
I1Q:=SUB (D2=D1, QUANT (I1T, I10, DI1T, D2)) $
I2Q:=SUB (D2=D1, QUANT (I2T, I20, DI2T, D2)) $
I3Q:=SUB (D2=D1, QUANT (I3T, I30, DI3T, D2)) $
I4Q:=SUB (D2=DD1, QUANT (I4T, I40, DI4T, D2)) $
ICQ:=T0* (1+ (X0/2)) *I10+ (1/2) * (T1+T2) *I20+
      (1/8) * (T2-3*T1) *I30+ (1/2) T3*I40+
      (AGA2*NA) / (16*MI*AZERO**2) $
DELTAQ:=(T0* (1+ (X0/2)) -150/ (NA*AZERO**2)) *I1Q+
      (1/2) * (T1+T2) *I2Q+ (1/8) * (T2-3*T1) *I3Q+
      (1/2) T3*I4Q-ICQ$
MASQ:=(1/MI) * (1+K*I1Q) $
MASC:=(1/MI) * (1+K*I1) $
ON BIGFLOAT, NUMVAL$
EEME:=938.280/ ((2.99E23) **2) $
MII:=(NA+EEME) /4$
AGACOR2:=(6.5822E-22) **2$
KA:=8*MII*300/ ((NA**2) *AGACOR2) $

```

COMMENT O VALOR DE AAZERO DEPENDERÁ DO NÚCLEO. "FATOR" E

"FATORQ" SÃO, RESPECTIVAMENTE, OS FATORES DE ENHANCEMENT
DA MASSA NO MSC E MCG, RESPECTIVAMENTE.\$

AAZERO:= \$

FATOR:=KA* (SUB (AZERO=AAZERO, Q=0, YEXP=1, I1)) \$

FATORQ:=KA*SUB (AZERO=AAZERO, X=0, I1Q) \$

WRITE "FATOR=", FATOR, "FATORQ=", FATORQ\$

VQUA:=SUB (AZERO=AAZERO, T0=-1128.75, T1=395, T2=-95

T3=14000, X0=0.45, K=KA, MI=MII, AGA2=AGACOR2,

DELTAQ) \$

VQUA0:=SUB (X=0, VQUA) \$

MASQUA:=SUB (K=KA, MI=MII, AZERO=AAZERO, MASQ) \$

MASCLA:=SUB (K=KA, MI=MII, AZERO=AAZERO, MASC) \$

VCLA:=SUB (AZERO=AAZERO, T0=-1128.75, T1=395, T2=-95

T3=14000, X0=0.45, DELTA) \$

VCLA0:=SUB (Q=0, YEXP=1, VCLA) \$

KMOLA:=SUB (AZERO=AAZERO, T0=-1128.75, T1=395, T2=-95

T3=14000, X0=0.45, Q=0, KM) /AAZERO**2 \$

KQ:=SUB (X=0, DF (VQUA, X, 2)) /AAZERO**2\$

COMMENT POTENCIAL DO MSC.\$

WRITE "VCLA=", VCLA\$

COMMENT POTENCIAL DO MCG.\$

WRITE "VQUA=", VQUA\$

COMMENT INVERSO DA MASSA (MSC).\$

WRITE "MASCLA=", MASCLA\$

 COMMENT INVERSO DA MASSA (MCG).\$

WRITE "MASQUA=", MASQUA\$

 COMMENT COEFICIENTES DE INCOMPRESSIBILIDADE DOS
 POTENCIAIS DO MSC E MCG, RESPECTIVAMENTE.\$

WRITE "KMOLA=", KMOLA, "KQ=", KQ\$

 COMMENT ENERGIAS POTENCIAIS DE PONTO ZERO DO MSC
 E MCG, RESPECTIVAMENTE.

WRITE "V CLAS PTO 0=", VCLA0, "VQUA PTO 0=", VQUA0\$

OFF BIGFLOAT, NUMVAL\$

 COMMENT OS DADOS ABAIXO VÃO PARA O PROGRAMA
 QUE CALCULA A MATRIZ H (APÊNDICE 2)\$

ON FORT\$

WRITE "I1T=", I1T, "\$"\$

WRITE "I2T=", I2T, "\$"\$

WRITE "I3T=", I3T, "\$"\$

WRITE "I4T=", I4T, "\$"\$

WRITE "I10=", I10, "\$"\$

WRITE "I20=", I20, "\$"\$

WRITE "I30=", I30, "\$"\$

WRITE "I40=", I40, "\$"\$

WRITE "D1=", D1, "\$", "DD1=", DD1, "\$"\$

WRITE "NA=", NA, "\$"\$

```
WRITE "I1Q:=", I1Q, "$"$  
WRITE "I2Q:=", I2Q, "$"$  
WRITE "I3Q:=", I3Q, "$"$  
WRITE "I4Q:=", I4Q, "$"$  
WRITE "ICQ1:=", ICQ1, "$"$  
WRITE "DI1T:=", DI1T, "$", "DI2T:=", DI2T, "$"$  
WRITE "DI3T:=", DI3T, "$", "DI4T:=", DI4T, "$"$  
OFF FORT$  
ON NAT$  
END$
```

Apêndice 2

Cálculo da matriz H - Programa em reduce

OFF NAT\$

COMMENT ESTE PROGRAMA CALCULA OS ELEMENTOS DE MATRIZ
DO POTENCIAL E ENERGIA CINÉTICA,SEPARADAMENTE, DAS
HAMILTONIANAS DO MSC E MCG,SOMANDO-OS, NO FINAL. NOS
COMENTÁRIOS ABAIXO, O SÍMBOLO H(n) REPRESENTA O
POLINÔMIO DE HERMITE DE GRAU N.\$

PROCEDURE FACT PP\$

BEGIN SCALAR M\$

M:=1\$

L1:IF PP=0 THEN RETURN M\$

M:=M * PP\$

PP:=PP - 1\$

GO TO L1\$

END\$

PROCEDURE GAMA XX\$

BEGIN SCALAR Y,W,ZIZ\$

IF XX =1/2 THEN {{Y:=SQRT PI\$}}

ELSE {{ZIZ:=XX- (1/2) \$

Y:=(FOR W:=ZIZ PRODUCT (2*W-1)) *SQRT (PI)/ (2**ZIZ) \$)}}\$

RETURN Y\$

END\$

COMMENT CALCULA AS INTEGRAIS DO TIPO

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_p(z) \exp(-(z^2)) dz$$

$$z a = n, z b = p$$

\$

```
PROCEDURE JOTA (ZA,ZB)$
```

```
BEGIN SCALAR Y2$
```

```
IF ZA<0 THEN ((Y2:=0$))
```

```
ELSE ((IF ZB<0 THEN ((Y2:=0$))
```

```
ELSE
```

```
((IF ZA NEQ ZB THEN ((Y2:=0$))
```

```
ELSE ((Y2:=SQRT (PI)* (2**ZA) *FACT (ZA$))))))$
```

```
RETURN Y2$
```

```
*****
```

```
COMMENT CALCULA INTEGRAIS DO TIPO
```

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_p(z) \exp(-a(z^2)) dz$$

$$z_t = a, z_e = n, z_f = p$$

```
$
```

```
*****
```

```
PROCEDURE ENE (ZT,ZE,ZF)$
```

```
BEGIN SCALAR Y4$
```

```
IF ZT=1 THEN ((Y4:=JOTA (ZE,ZF$))
```

```
ELSE
```

```
((IF ZE< 0 THEN ((Y4:=0$)) ELSE
```

```
((IF ZF< 0 THEN ((Y4:=0$)) ELSE
```

```
((IF DEN ((ZE+ZF)/2)=1 THEN
```

```
((ALF:=SQRT (ZT/2) $ALF1:=(ALF **2)/((2*ALF **2) -1)$
```

```
Y4:=(2**((ZE +ZF -1)/2)) * (ALF ** (-(ZE +ZF +1))) *
```

```
((1-2*ALF **2) ** ((ZE +ZF)/2)) * (GAMA((ZE +ZF +1)/2)) *
```

```
HIPER (-ZE, -ZF, NP, ALF1$))
```

```
ELSE ((Y4:=0$))))))$
```

```
RETURN Y4$
```

```
END$
```

```
*****
```

```
COMMENT CALCULA HIPERGEOMÉTRICA
```

$$F(\alpha, \beta; \gamma, z) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma} z + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)1} z^2 + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\beta(\beta+1)(\beta+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)1} z^3 + \dots$$

É CHAMADA NA SUBROTINA ENES

PROCEDURE HIPER (ZG,ZH,ZJ,ZK) \$

BEGIN SCALAR ZI, Y5, ZI\$

ZI:=0\$ Y5:=1\$

WHILE ((ZG +ZI)*(ZH +ZI)) NEQ 0 DO

<<(Y5:=Y5 + (FOR ZL:=0 : ZI PRODUCT ((ZG +ZL)* (ZH +ZL)/
((ZJ +ZL)* (1 +ZL))))* (ZK** (ZI +1)) \$ZI:=ZI +1\$)>>\$

RETURN Y5\$

END\$

COMMENT CALCULA INTEGRAL DO TIPO

$$\int_{-\infty}^{\infty} H_n(z) H_p(z) * (z ** s) \exp(-b(z ** 2)) dz$$

$$zm = b, zn = s, zo = n, zp = p$$

\$

PROCEDURE NOVA (ZM,ZN,ZO,ZP)\$

BEGIN SCALAR Y6, ZO, ZZ \$

IF ZO< 0 THEN <<(Y6:=0 \$)>> ELSE

<<(IF ZP< 0 THEN <<(Y6:=0 \$ ELSE

<<(IF ZN=0 THEN <<(Y6:=ENE (2M, ZO, ZP)\$)>>

ELSE

<<(ZO:=2N -1\$ ZZ:=ZO\$

IF ZO NEQ 0 AND ZP NEC 0 THEN

<<(IF ZZ=0 THEN <<(Y6:=(1/(2*ZM))* (2*ZP* ENE (ZM,ZO,ZP -1)

+2* ZO* ENE (ZM, ZO -1, ZP)) \$)>> ELSE

<<(Y6:=(1/ (2*ZM)) * (ZZ * NOVA (ZM, ZZ -1, ZP)

```

+2*ZP* NOVA (ZM, ZZ, ZO, ZP -1) + 2* ZO*
NOVA (ZM, ZZ, ZO, ZO -1, ZP) $ ))))
ELSE
((IF ZO=0 AND ZP=0 THEN ((IF DEN (ZN/2)=1 THEN
((Y6:=(GAMA ((ZN +1)/2))/(2M** ((ZN +1) /2)) $))
ELSE ((Y6:=0 $ )))) ELSE
((IF ZZ=0 THEN ((Y6:=((ZO +ZP)/ZM) *
ENE (ZM,ZO,ZP-1,0)$))
ELSE ((Y6:=(1/ (2*ZM)) *
(ZZ * NOVA (ZM, ZZ -1, ZO, ZP, 0)+2* (ZO +ZP)*
NOVA (2M, ZZ, ZO + ZP -1, 0)) $ )))))))))))$
RETURN Y6 $
END $

```

```

*****
COMMENT CALCULA ELEMENTOS DE MATRIZ DOS POTENCIAIS,
CALCULANDO O VALOR MÉDIO DE CADA INTEGRAL DESTES ENTRE
OS VETORES DA BASE.

```

```

ZRP=POLINÔMIO REFERENTE A UMA INTEGRAL DA
EXPRESSÃO (36)

```

```

GP=( FATOR QUE MULTIPLICA  $(\beta * q) **2$  NA
EXPONENCIAL QUE MULTIPLICA O POLINÔMIO) + 1

```

```

DZR=GRAU DO POLINÔMIO

```

```

ZITP=N, ZUP=P, CZR=MATRIZ QUE CONTÉM
OS COEFICIENTES DO POLINÔMIO ZRP $

```

```

*****

```

```

PROCEDURE PRIM (ZRP,GP,DZR,ZITP,ZUP,CZR)$

```

```

BEGIN SCALAR ELEITP,ELE $

```

```

IF DZR NEQ 0 THEN

```

```

((FOR ZVP:=0:DZR DO ((IF CZR (ZVP) NEC 0 THEN

```

```

((ELE:=CZR (ZVP)* FAT ** (ZVP/2)* NOVA (GP,ZVP,ZITP,ZUP)/
DEN (ZRP)$))

```

```

ELSE((ELE:=0 $))$

```

```

ELEITP:=ELEITP +ELE $)))))

```

```

ELSE ((ELEITP:=ZRP* ENE (GP,ZITP,ZUP)$))$

```

```

RETURN ELEITP$

```

END\$

 COMMENT CALCULA OS ELEMENTOS DE MATRIZ DA PARTE CONSTANTE
 DOS POTENCIAIS, CALCULANDO O VALOR MÉDIO DE CADA INTEGRAL
 ONDE "Q" FOI IGUALADO A ZERO.

ZS=EXPRESSÃO REFERENTE A UMA INTEGRAL DA
 EXPRESSÃO (36) CALCULADA EM Q=0

ZITI=N, ZUT=P \$

 PROCEDURE ELEMENTO (ZS, ZITI, ZUT)\$

BEGIN SCALAR ELEIO\$

ELEIO:=ZS*JOTA(ZITI,ZUT)\$

RETURN ELEIO\$

END\$

 COMMENT AQUI ENTRAM OS DADOS VINDOS DO PROGRAMA DO
 APÊNDICE 10 DADO " ICQ1 " DEVE FICAR DEPOIS DA
 LINHA " ON BIGFLOAT,NUMVAL "

O VALOR DE AAZERO DEPENDERÁ DO NÚCLEOS

 ON BIGFLOAT, NUMVAL\$

ICQ:= \$

EEME:=938.280/ ((2.99E23) **2) \$

MII:=(NA*EEME) /4\$

FAT:=4/NA\$

AGACOR2:=(6.5822E-22) **2\$

KA:=-300*8*MII/ ((NA**2) *AGACOR2) \$

AAZERO:= \$

BBETA:=1/AAZERO\$

CONST:=- (AGACOR2* (BBETA) **2) / (2*MII*SQRT PI) \$

OFF BIGFLOAT, NUMVAL\$

B:=FAT* D1+1\$

DID1:=D1*NA/ (NA-4*D1) \$

DID1L:=DID1*FAT\$

BQ:=DID1L+1\$

```

BB:=FAT*DD1+1$
DIDD1:=DD1*NA/ (NA-4*DD1) $
DIDD1L:=DIDD1*FAT$
BBQ:=DIDD1L+1$
ARRAY COI 10, COI2 10, COI3 10, COI4 20,
COQ 20, COQ2 20, COQ3 20, COQ4 20$
IF DI1T NEQ 0 THEN COEFF (NUM I1T, Z, COI) $
IF DI2T NEQ 0 THEN COEFF (NUM I2T, Z, COI2) $
IF DI3T NEQ 0 THEN COEFF (NUM I3T, Z, COI3) $
IF DI4T NEQ 0 THEN COEFF (NUM I4T, Z, COI4) $
I1TQ:=SUB (X=Z, I1Q* (E** (DID1*X**2))) $
I2TQ:=SUB (X=Z, I2Q* (E** (DID1*X**2))) $
I3TQ:=SUB (X=Z, I3Q* (E** (DID1*X**2))) $
I4TQ:=SUB (X=Z, I4Q* (E** (DIDD1*X**2))) $
DI1Q:=DEG (NUM I1TQ, Z) $
DI2Q:=DEG (NUM I2TQ, Z) $
DI3Q:=DEG (NUM I3TQ, Z) $
DI4Q:=DEG (NUM I4TQ, Z) $
IF DI1Q NEQ 0 THEN COEFF (NUM I1TQ, Z, COQ) $
IF DI2Q NEQ 0 THEN COEFF (NUM I2TQ, Z, COQ2) $
IF DI3Q NEQ 0 THEN COEFF (NUM I3TQ, Z, COQ3) $
IF DI4Q NEQ 0 THEN COEFF (NUM I4TQ, Z, COQ4) $
ARRAY ELEMAT (11,11) ,ELEMAQ (11,11) $
*****
COMMENT JIN E JON EXPRESSAM O NÚMERO DE LINHAS E
COLUNAS DA MATRIZ H$
*****
JIN:=10$   JON:=10$
FOR N:=0:JIN DO
  ((FOR P:=0:JON DO ((ELET:=0$   NP:=(1-N-P) /2$
  ELEQ:=0$
  IF DI1T=0 THEN ((IENE:=ENE (B,N,P) $
  IENEI:=ENE (B, N-1, P-1) $
  INON:=NOVA (B,1,N,P-1) $   INOP:=NOVA (B,1,N-1,P) $
  ELET:=I1T*K* ((-N-P-1) *IENE-4*N*P*IENEI+

```

```

2*N*INOP+2*P*INON) $))
ELSE ((FOR L:=0:DI1T DO ((COF:=COI (L) / DEN (I1T) $
IF COF NEQ 0 THEN ((INODI:=NOVA (B,L,N,P) $
INOD:=NOVA (B,L,N-1,P-1) $INODIP:=NOVA (B,L+1,N-1,P) $
INODIN:=NOVA (B,L+1,N,P-1) $
ELET:=ELET+COF*K* ((-N-P-1) *INODI-4*N*P*INOD+
2*N*INODIP+2*P*INODIN) $))))))$
JONP:=JOTA (N,P) $
OCTE:=SQRT (2** (N+P) *FACT(N)*FACT (P)) $
JONQ:=JOTA (N-1,P-1) $ INOT:=NOVA (1,1,N-1,P) $
NOTI:=NOVA (1,1,N,P-1) $
*****
COMMENT ELECINT É O ELEMENTO DE MATRIZ DE
ORDEM (N,P) DA ENERGIA CINÉTICA (MSC)$
*****
ELECINT:=(1/2) * CTE* ((-N-P-1) *JONP-4*N*P*JONQ+
2*N*INOT+2*P*NOTI+ELET) /OCTE$
IF DI1Q=0 THEN ((ENEQ:=ENE (BQ,N,P) $
IENEQ:=ENE (BQ,N-1,P-1) $ NOQII:=NOVA (BQ,1,N,P-1) $
NOQI:=NOVA (BQ,1,N-1,P) $
ELEQ:=I1TQ*K* ((-N-P-1) *ENEQ+4*N*P*IENEQ+
2*P*NOQII+2*N*NOQI) $))
ELSE ((FOR LQ:=0:DI1Q DO
((COFQ:=COQ (LQ)*FAT** (LQ/2) / DEN (I1TQ) $
IF COFQ NEQ 0 THEN ((NOQ:=NOVA (BQ,LQ,N,P) $
NOQQ:=NOVA (BQ,LQ,N-1,P-1) $
IINOQ:=NOVA (BQ,LQ+1,N,P-1) $
INOQ:=NOVA (BQ,LQ+1,N-1,P) $
ELEQ:=ELEQ+ COFQ*K* ((-N-P-1) *NOQ-4*N*P*NOQQ+
2*P*IINOQ+2*N*INOQ) $))))))$
*****
COMMENT ELECINQ Ó ELEMENTO DE MATRIZ DE
ORDEM (N,P) DA ENERGIA CINÉTICA (MCG) $
*****
ELECINQ:=(1/2) *CTE* ((-N-P-1) *JONP-4*N*P*JONQ+

```

$$2*N*INOT+2*P*NOTI+ELEQ) /OCTE\$$$

ARRAY CZR 20\\$

$$ELEI1F:=T0*(1+(X0/2)) * (PRIM (I1T, B, DI1T, N, P, COI) - \\ ELEMENTO (I1Q, N, P)) \$$$

$$ELEI2F:=(1/2) * (T1+T2) * (PRIM (I2T, B, DI2T, N, P, COI2) - \\ ELEMENTO (I2Q, N, P)) \$$$

$$ELEI3F:=(1/8) * (T2-3*T1) * (PRIM (I3T, B, DI3T, N, P, COI3) - \\ ELEMENTO (I3Q, N, P)) \$$$

$$ELEIF:=(1/2) *T3 * (PRIM (I4T, BB, DI4T, N, P, COI4) - \\ ELEMENTO (I4Q, N, P)) \$$$

$$ELEICO:=ICQ1*JONP\$$$

$$ELEI1Q:=PRIM (I1TQ, BQ, DI1Q, N, P, COQ) \$$$

$$ELEI2Q:=PRIM (I2TQ, BQ, DI2Q, N, P, COQ2) \$$$

$$ELEI3Q:=PRIM (I3TQ, BQ, DI3Q, N, P, COQ3) \$$$

$$ELEI4Q:=PRIM (I4TQ, BBQ, DI4Q, N, P, COQ4) \$$$

COMMENT ELEDEL E ELEDELQ SÃO OS ELEMENTOS DE MATRIZ DE
ORDEM (N,P) DOS POTENCIAIS DO MSC E MCG, RESPECTIVAMENTE \\$

$$ELEDEL:=CCTE* (ELEI1F+ELEI2F+ELEI3F+ELEI4F) /OCTE\$$$

$$ELEDELQ:=((T0* (1+(X0/2)) -150*BETA**2/NA) *ELEI1Q+ \\ (1/2) * (T1+T2) *ELEI2Q+ (1/8) * (T2-3*T1) *ELEI3Q+ \\ (1/2) *T3*ELEI4Q-ELEIC) *CCTE/OCTE\$$$

$$ELELTA:=ELECINT+ELEDEL\$$$

$$ELELTQ:=ELECINQ+ELDELQ\$$$

ON BIGFLOAT,NUMVAL\\$

COMMENT ELEMAT (N,P) E ELEMAQ (N,P) SÃO OS ELEMENTOS DE MATRIZ
DE H^{msc} E H^{mcg} , RESPECTIVAMENTE\\$

$$ELEMAT (N,P) :=SUB (BETA=BBETA, CTE=CONST, K=KA,$$

$$AZERO=AAZERO, CCTE=1/SQRT PI, T0=-1128.75,$$

$$T1=395, T2=-95, T3=14000, X0:=0.45, ELELTA) \$$$

$$ELEMAQ (N,P) :=SUB (BETA=BBETA, CTE=CONST, K=KA,$$

$$AZERO=AAZERO, CCTE=1/SQRT PI, T0=-1128.75,$$

```
T1=395, T2=-95, T3=14000, X0:=0.45,  
MI=MII, ELELTQ) $  
OFF BIGFLOAT,NUMVAL$)))))$  
ON BIGFLOAT,NUMVAL$  
FOR JI:=0:JIN DO ((FOR JO:=0:JON DO  
((WRITE "ELEMAT ( ",JI+1, ",",JO+1,") =",  
ELEMAT (JI,JO) $))))$  
FOR JIQ:=0:JIN DO ((FOR JOQ:=0:JON DO  
((WRITE "ELEMAQ ( ",JIQ+1, ",",JOQ+1,") =",  
ELEMAQ (JIQ,JOQ) $))))$  
OFF BIGFLOAT,NUMVAL$  
ON NAT$  
END$
```

Apêndice 3

Expansão na não localidade

A hamiltoniana coletiva do MCG é dada por

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \hat{S}_c \hat{H} \hat{S}_c \quad (A.1)$$

Utilizando a expressão do projetor \hat{S}_c na representação de coordenadas, temos

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \int dx dx' |x\rangle \langle x| \hat{H} |x'\rangle \langle x'| \quad (A.2)$$

Na expressão acima, pode-se realizar uma expansão em termos da função $\delta(x - x')$ e suas derivadas (expansão na não localidade). Mostramos, a seguir, como isto foi feito na referência 8.

Faz-se uma mudança de variáveis:

$$x = y + \frac{\xi}{2}$$

$$x' = y - \frac{\xi}{2}$$

A expansão na não localidade é dada por

$$\langle y + \frac{\xi}{2} | \hat{H} | y - \frac{\xi}{2} \rangle = \sum_m H^{(m)}(y) (-i \frac{\partial}{\partial \xi})^m \delta(\xi) \quad (A.3)$$

onde

$$\hat{H}^{(m)}(y) = \int d\xi \frac{(-i\xi)^m}{m!} \langle y + \frac{\xi}{2} | \hat{H} | y - \frac{\xi}{2} \rangle \quad (A.4)$$

Substituindo-se (A.3) em (A.2), obtém-se

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \int dy d\xi |y + \frac{\xi}{2}\rangle \sum_m H^{(m)}(y) \left((-i)^m \frac{\partial^m}{\partial \xi^m} \delta(\xi) \right) \langle y - \frac{\xi}{2} |$$

Através de integrações por partes, esta equação pode ser reescrita como

$$\hat{H}^{m_{cg}} = \sum_m \sum_{k=0}^m (i)^m \binom{m}{k} \int dy \left[\left(\frac{\partial^{m-k}}{\partial \xi^{m-k}} |y + \frac{\xi}{2}\rangle \right) H^{(m)}(y) \left(\frac{\partial^k}{\partial \xi^k} \langle y - \frac{\xi}{2} | \right) \right]_{\xi=0} \quad (A.5)$$

Sabendo-se que

$$|x + \frac{\xi}{2}\rangle = \exp(-i\frac{\xi}{2}P_s) |x\rangle$$

escrevemos

$$\hat{H}^{mcg} = \sum_m \sum_{k=0}^m \frac{1}{2^m} \binom{m}{k} \hat{P}_s^{(m-k)} H^{(m)}(\hat{Q}_s) \hat{P}_s^k \quad (A.6)$$

A expressão acima pode ser escrita como uma série de anticomutadores:

$$\hat{H}^{mcg} = H^{(0)}(\hat{Q}_s) + \frac{1}{2} \{\hat{P}_s, H^{(1)}(\hat{Q}_s)\} + \frac{1}{4} \{\hat{P}_s, \{\hat{P}_s, H^{(2)}(\hat{Q}_s)\}\} + \dots \quad (A.7)$$

Como \hat{Q}_s , \hat{P}_s e \hat{H} são, respectivamente, par, ímpar e par por inversão temporal e considerando-se que $H^{(m)}(y)$ é uma função real,

$$H^{(m)}(y) = 0 \text{ para } m \text{ ímpar.}$$

Supondo válida a aproximação adiabática, obtemos, então

$$\hat{H}^{mcg} = \hat{S}_c \{ H^{(0)}(\hat{Q}) + \frac{1}{4} \{\hat{P}, \{\hat{P}, H^{(2)}(\hat{Q})\}\} \} \hat{S}_c \quad (A.8)$$

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BOHR, A. Rotational motion in nuclei. *Reviews of Modern Physics*. v.48, n.3, 1976.
2. COHEN, B.L. *Concepts of Nuclear Physics*. New York, Mc Graw-Hill, 1971.
3. FLOCARD, H., VAUTHERIN, D. Generator Coordinate calculations of giant resonances with the Skyrme interaction. *Nuclear Physics A*, v.264, p. 221-243, 1976.
4. GALETTI, D. From GCM Kernels to Weyl-Wigner Hamiltonians: a particular mapping. *J. Phys. G: Nucl. Phys.* v.11, p.711-720, 1985.
5. GOLDHABER, M., TELLER, E. On nuclear dipole vibrations. *Physical Review*. v.71, n.9, 1948.
6. GRIFFIN, J. J., WHEELER, J.A. Collective Motions in Nuclei by the Method of Generator Coordinates. *Physical Review*. v. 108, n.2, 1957.
7. MOTTELSON, B. Elementary modes of excitation in the nucleus. *Reviews of Modern Physics*. v.48, n.3, 1976.
8. PASSOS, E. J. V., CRUZ, F. F. S. Relationship between the semiclassical and the generator coordinate method. *Physical Review C*. v.24, n.2, 1981.
9. PIZA, A. F. R. T. et al. Properties of Griffin - Hill - Wheeler Spaces. *Physical Review C*. v.15, n.4, 1977.
10. PIZA, A. F. R. T. PASSOS, E. J. V. The Kinematics of Generator Coordinates. *Il Nuovo Cimento*. v.45 B, n.1, 1978.
11. RING, P., SCHUCK, P. *The Nuclear Many-Body Problem*. Berlin, Springer - Verlag, 1980.
12. ROWE, D.J. *Nuclear Collective Motion - Models and Theory*. London, Methuen and Co.Ltd., 1970.

13. SLAVOV, B. et al. Comparison of quantised ATDHF and GCM theory with application to the $^{12}\text{C} + ^{20}\text{Ne}$ system. J. Phys. G: Nucl. Part. Phys. v.16, p.395 - 415, 1990.
14. VAN DER WOUDE, A. Giant Resonances. Prog. Part. Nucl. Phys. v.18, p.217 - 293, 1978.
15. VAUTHERIN, D., BRINK, D. M. Hartree - Fock Calculations with Skyrme's Interaction. I. Spherical Nuclei. Physical Review C. v.5, n.3, 1972.