

Universidade Federal de Santa Catarina

Programa de Pós-Graduação em Física

MÉTODO VARIACIONAL PARA MODELOS NUCLEARES RELATIVÍSTICOS

Dissertação

Submetida ao Curso de Pós-Graduação em Física

Da Universidade Federal de Santa Catarina

Para obtenção de grau de

MESTRE EM FÍSICA

Fábio Bartolomeu Santana

Florianópolis, Dezembro de 1999.

MÉTODO VARIACIONAL PARA MODELOS NUCLEARES RELATIVÍSTICOS

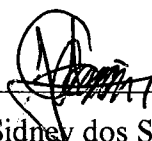
Fábio Bartolomeu Santana

Esta dissertação foi julgada adequada para a obtenção do título de

MESTRE EM FÍSICA

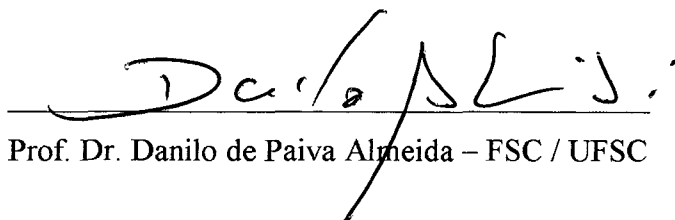
Especialidade Física Teórica e aprovada em sua forma final

Pelo Curso de Pós-Graduação em Física



Prof. Dr. Sidney dos Santos Avancini – FSC / UFSC

(Orientador)

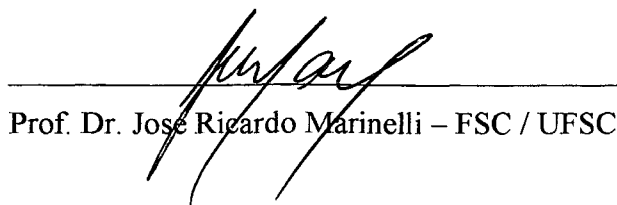


Prof. Dr. Danilo de Paiva Almeida – FSC / UFSC

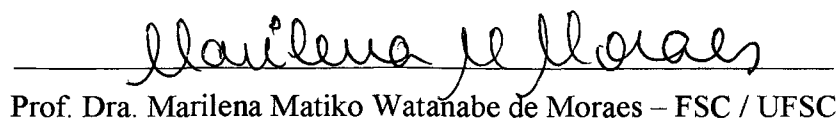
Banca examinadora



Prof. Dra. Débora Peres Menezes – FSC / UFSC



Prof. Dr. José Ricardo Marinelli – FSC / UFSC



Prof. Dra. Marilena Matiko Watanabe de Moraes – FSC / UFSC

Índice

Abstract.....	vi
Resumo.....	01
Introdução.....	02
Capítulo 1	
Método Variacional de Ponto-de-Sela (SPV).....	04
Capítulo 2	
Modelo de Walecka na Aproximação de Hartree Relativística.....	05
Capítulo 3	
Funcional de Energia na Aproximação de Hartree para o Núcleo do ${}^4\text{He}$	11
Capítulo 4	
Função de Onda de Partícula Independente para o Estado $1s_{1/2}$	16
Capítulo 5	
Cálculo dos Elementos de Matriz para o Estado $1s_{1/2}$	24
Capítulo 6	
Tabela de Parâmetros e Algoritmo Numérico.....	29
Capítulo 7	
Análise dos Resultados e Conclusões.....	31
Apêndice 1 – Oscilador Harmônico Tridimensional.....	40
Apêndice 2 – Detalhes dos Cálculos Matemáticos.....	42
Apêndice 3 – Equação de Dirac.....	58
Referências.....	61

“...Não digo que a ciência é útil porque nos ensina a construir máquinas;
digo que as máquinas são úteis porque, ao trabalhar para nós,
um dia nos deixarão mais tempo livre para fazer ciência.”

Henri Poincaré

“...é melhor prover a busca incessante e interminável,
do que descrever da mente humana.”

Stephen W. Hawking

Dedico este trabalho a todos aqueles que,
assim como eu, apreciam o papel da ciência
na evolução da humanidade.

Agradecimentos

Este trabalho representa parte do que aprendi no Departamento de Física, com Professores, colegas de curso e funcionários, ao longo dos últimos anos; muitos contribuíram de forma direta ou indireta. Contudo, alguns participaram expressivamente durante o tempo em que trabalhei nesta tese.

Agradeço aos funcionários da Coordenadoria do Curso de Pós Graduação em Física, dentre estes, Telma e Sônia, pela atenção e apreço.

Agradeço ao Professor e amigo, “Fred” (com o qual tive aulas excelentes!!), pela sua capacidade de ajudar e estar à disposição para discutir sobre as mais variadas questões.

Agradeço ao Professor e amigo, Sidney, pela orientação, paciência, flexibilidade e seriedade. Agradeço pela simplicidade com a qual sempre se dirigiu a minha pessoa, e também pela conversa aberta e divertida em muitos momentos.

Agradeço aos meus pais, irmãos, familiares e amigos, pelo respeito, reconhecimento e apoio ao meu trabalho.

Agradeço a minha esposa (e também a minha filha), pela companhia, paciência e compreensão em relação a minha ausência em muitas noites, sábados e domingos, dedicados ao estudo e ao trabalho.

Abstract

In this work we use a suitable variational method to obtain the ground state energy eigen-functions in relativistic nuclear problems. We study the ${}^4\text{He}$ nucleus and we reproduce the results of the TIMORA program, which describes the Walecka model in a relativistic Hartree approximation solving the Dirac single-particle equation numerically. We use MINIMAX variational method in order to obtain an approximate solution to the same Dirac equation. We show that the MINIMAX method is suitable to solve this problem. Our motivation is to verify the viability of using the saddle-point variational method in other systems.

Resumo

O objetivo deste trabalho é aplicar um método variacional adequado para obter a energia e a função de onda do estado fundamental em problemas nucleares relativísticos. Nós estudamos o núcleo do átomo de hélio (${}^4\text{He}$) e buscamos reproduzir o resultado obtido pelo código Timora, que descreve o estado fundamental do núcleo de hélio (${}^4\text{He}$) através do modelo de Walecka utilizando a aproximação de Hartree relativística, resolvendo numericamente a equação (diferencial) de Dirac de partícula independente. Utilizamos o método variacional MINIMAX para obter uma solução aproximada da mesma equação de Dirac. Mostramos que o método MINIMAX é o método variacional adequado à solução da equação de partícula independente. A motivação para este trabalho é verificar a viabilidade de aplicação do método variacional de ponto-de-sela em outros sistemas de interesse.

Introdução

O objetivo deste trabalho é obter o valor da energia de partícula independente para o estado $1s_{1/2}$ do núcleo de hélio (${}^4\text{He}$) tomando como referência os resultados obtidos pelo código Timora. Vamos aplicar o modelo de Walecka na aproximação de Hartree relativística. Nesta aproximação o problema se reduz a solução de uma equação de Dirac sujeita a um potencial auto-consistente e esse potencial foi obtido por Brockmann [1]. Verificamos que uma boa escolha para as funções que compõem a base é muito útil para o cálculo deste potencial e também observamos o comportamento de nossos resultados para diversas dimensões de base e constatamos que os resultados melhoram à medida que a dimensão da base aumenta. Uma análise detalhada dos resultados está descrita no capítulo 7. Uma breve discussão sobre o modelo de Walecka pode ser encontrada no capítulo 2.

Para a descrição do estado fundamental do núcleo do ${}^4\text{He}$ vamos obter a solução da equação de Dirac de partícula independente aplicando o método variacional de ponto-de-sela (SPV), onde vamos tomar uma base formada pelos polinômios de Laguerre, ou seja, as soluções do oscilador harmônico tridimensional. Em princípio, qualquer conjunto de funções ortogonais pode ser escolhido, porém, os polinômios de Laguerre são adequados aos cálculos numéricos e também apresentam propriedades matemáticas bem conhecidas. Algumas destas propriedades podem ser verificadas no apêndice 1.

O método SPV nos permite efetuar muitos dos cálculos analiticamente. No entanto, como o potencial é do tipo auto-consistente, utilizamos uma rotina numérica, programada em linguagem FORTRAN [2][3], que nos permite obter o potencial auto-consistente e também observar o comportamento dos resultados para várias dimensões de base.

A aplicação de método SPV requer uma parametrização bem característica. Esta parametrização consiste em inserir dois parâmetros variacionais; um que minimize a solução da energia relativamente a componente grande e outro que maximize a solução da energia relativamente a componente pequena. Uma vez escolhida esta parametrização, é através de rotinas

numéricas que são feitos os procedimentos variacionais, ou seja, o cálculo auto-consistente do potencial e o zero das derivadas (em relação aos parâmetros escolhidos) do funcional de energia. Uma descrição mais detalhada sobre o método SPV é apresentada no capítulo 1. Os detalhes dos procedimentos numéricos estão descritos no capítulo 6.

Como grande parte dos cálculos são feitos analiticamente, torna-se inevitável a apresentação dos detalhes matemáticos. Assim, por conveniência, em vários momentos serão apresentados apenas os resultados mais importantes. Ao leitor interessado, o apêndice 2 foi destinado a esclarecer os detalhes matemáticos. O apêndice 3 foi inserido com o objetivo de oferecer algumas informações básicas adicionais. Lá encontra-se uma breve discussão sobre a equação de Dirac.

Capítulo 1

Método Variacional de Ponto-de-Sela (SPV)

Os métodos variacionais são extremamente aplicados nos mais variados sistemas físicos. Em particular, para sistemas quânticos de muitos corpos, o uso destes métodos é extremamente útil, pois torna possível uma solução aproximada destes sistemas onde a solução exata é impossível. Como exemplo podemos citar a solução para o átomo de hélio[4], onde o uso de uma parametrização adequada e uma posterior minimização do valor esperado do hamiltoniano fornece uma melhor aproximação para o valor da energia do estado fundamental.

Contudo, sistemas quânticos relativísticos são descritos pela equação de Dirac, e neste caso, o método variacional não pode ser aplicado como no caso da equação de Schroedinger devido a existência dos estados de energia negativa, ou seja, não há um valor mínimo para a energia, o que inviabiliza a aplicação dos procedimentos variacionais usuais. Uma alternativa para contornar esta dificuldade é a utilização de dois parâmetros variacionais na descrição do estado; um que minimize com relação aos estados de energia positiva, e outro que maximize com relação aos estados de energia negativa. O procedimento variacional adequado a equação de Dirac é então [5]:

$$E = \min_g \left\{ \max_f \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \right\},$$

onde H é o hamiltoniano de Dirac e g e f são os componentes grande e pequeno do spinor ψ .

Assim, obtém-se um ponto de sela para a energia (em função destes parâmetros). Este método é conhecido como Método Variacional de Ponto-de-Sela (SPV). Nas últimas duas décadas o SPV ganhou certa formalidade matemática [5] e foi aplicado na descrição de vários sistemas [6][7][8].

Capítulo 2

Modelo de Walecka na Aproximação de Hartree Relativística

A interação forte entre os nucleons é gerada pela troca de mésons. Esta interação nucleon-nucleon (N-N) é predominantemente atrativa à longas distâncias e repulsiva à curtas distâncias. O modelo de Walecka está baseado na troca de mésons entre os nucleons. A motivação para este modelo de troca de partículas é forte, porque as evidências experimentais comprovam a existência, na natureza, de vários tipos de mésons. A tabela abaixo ilustra alguns mésons, sendo que os valores apresentados para as massas e para as constantes de acoplamento não são rigorosamente fixos.

Méson	Isospin	Massa (Mev)	Acoplamento ($\frac{g^2}{4\pi}$)
π	1	138,7	14,19
η	0	548,5	3,09
σ	0	570	6,97
δ	1	960	0,33
ρ	1	763	0,43
ω	0	782,8	9,92

Tabela 2.1 – Principais mésons com suas respectivas massas e constantes de acoplamento g , segundo Ref. [1]

Para reproduzir qualitativamente as propriedades básicas da interação N-N [9] é suficiente considerar a troca de dois mésons: ômega e sigma. Assim, o potencial central efetivo [9] para a interação N-N pode ser considerado como

$$V_{eff} = \frac{g_{\omega}^2}{4\pi} \frac{e^{-m_{\omega}r}}{r} - \frac{g_{\sigma}^2}{4\pi} \frac{e^{-m_{\sigma}r}}{r}, \quad [2.01]$$

onde r é o módulo do vetor que define a posição relativa entre dois nucleons.

Para valores apropriados das constantes de acoplamento (g_ω e g_σ) e das massas (m_ω e m_σ), este potencial é atrativo à longas distâncias e repulsivo à curtas distâncias, de acordo com a força nuclear observada, e neste trabalho vamos considerar apenas estes dois mésons. Não levaremos em conta a troca de píons, pois este efeito é nulo devido ao fato de termos spin zero no estado fundamental e o méson π (pi) possuir spin unitário, não ocorrendo então o acoplamento. De acordo com a ref.[9], a densidade Lagrangeana que descreve as propriedades dinâmicas do núcleo, levando em conta o potencial efetivo [2.01], é dada por

$$L_I = \bar{\varphi}[\gamma_\mu (i\partial^\mu - g_\omega V^\mu) - (M - g_\sigma \phi)]\varphi + \frac{1}{2}(\partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - m_\sigma^2 \phi^2) - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_\omega^2 V_\mu V^\mu + \delta L, \quad [2.02]$$

onde $\phi \rightarrow \phi(\vec{x}, t)$ é o campo do méson escalar σ ; $V_\mu \rightarrow V_\mu(\vec{x}, t)$ é o campo do méson vetorial ω e $\varphi \rightarrow \varphi(\vec{x}, t)$ é o campo do nucleon. Temos ainda,

$$F_{\mu\nu} = \partial_\mu V_\nu - \partial_\nu V_\mu. \quad [2.03]$$

O fator δL contém os contratermos gerados pela renormalização, necessários em qualquer teoria quântica de campos. Este termo será negligenciado daqui em diante e isto pode ser feito sem perda de generalidade pois as constantes de acoplamento podem ser ajustadas de maneira a reproduzir os efeitos deste termo. As equações para os campos são obtidas a partir da equação de Euler-Lagrange,

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial L}{\partial (\partial_\mu q_i)} \right] - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad [2.04]$$

onde q_i são as coordenadas generalizadas, ou seja, os campos: $q_1 = \phi$, $q_2 = V_\mu$ e $q_3 = \bar{\varphi}$.

A Lagrangeana dada por [2.02] pode ser escrita mais convenientemente na forma

$$L_I = \bar{\varphi} \gamma_\mu i \partial^\mu \varphi - \bar{\varphi} g_\omega \gamma_\mu V^\mu \varphi - \bar{\varphi} (M - g_\sigma \phi) \varphi + \frac{1}{2} \partial_\mu \phi \partial^\mu \phi - \frac{1}{2} m_\sigma^2 \phi^2 + \\ - \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} + \frac{1}{2} m_\omega^2 V_\mu V^\mu + \delta L.$$

a partir da qual vamos obter as equações de campo dos mésons considerados e do nucleon.

Para $q_1 = \phi$ teremos

$$\partial_\mu \left[\frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu \phi)} \right] - \frac{\partial L}{\partial \phi} = 0. \\ \rightarrow \frac{\partial L}{\partial(\partial_\mu \phi)} = \partial^\mu \phi \\ \rightarrow \frac{\partial L}{\partial \phi} = \bar{\varphi} g_\sigma \varphi - m_\sigma^2 \phi$$

e então

$$(\partial_\mu \partial^\mu + m_\sigma^2) \phi = g_\sigma \bar{\varphi} \varphi.$$

Esta é a equação de Klein-Gordon, com fonte de mésons escalares ($g_\sigma \bar{\varphi} \varphi$) que nos dá a dinâmica do campo dos mésons sigma.

Para $q_2 = V_\mu$ teremos:

$$\partial_\kappa \left[\frac{\partial L}{\partial(\partial_\kappa V_{\mu'})} \right] - \frac{\partial L}{\partial V_{\mu'}} = 0, \quad [2.05]$$

$$\rightarrow \frac{\partial L}{\partial(\partial_\kappa V_{\mu'})} = \frac{\partial}{\partial(\partial_\kappa V_{\mu'})} \left[- \frac{1}{4} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \right], \quad [2.06]$$

onde substituindo [2.03] na expressão acima obtemos

$$\frac{\partial}{\partial(\partial_\kappa V_{\mu'})} \left[- \frac{1}{4} (\partial_\mu V_\nu \partial^\mu V^\nu - \partial_\nu V_\mu \partial^\mu V^\nu - \partial_\mu V_\nu \partial^\nu V^\mu + \partial_\nu V_\mu \partial^\nu V^\mu) \right].$$

Na expressão anterior, o termo entre colchetes deve ser escrito de forma conveniente para que possamos efetuar corretamente as derivadas. Para isto vamos aplicar a métrica $g^{\mu\nu}$ para obtermos $V^\mu = g^{\mu\nu}V_\nu$. Assim:

$$\left(\partial_\mu V_\nu g^{\mu\bar{\mu}} g^{\nu\bar{\nu}} \partial_{\bar{\mu}} V_{\bar{\nu}} - \partial_\nu V_\mu g^{\mu\bar{\mu}} g^{\nu\bar{\nu}} \partial_{\bar{\mu}} V_{\bar{\nu}} - \partial_\mu V_\nu g^{\nu\bar{\nu}} g^{\mu\bar{\mu}} \partial_{\bar{\nu}} V_{\bar{\mu}} + \partial_\nu V_\mu g^{\nu\bar{\nu}} g^{\mu\bar{\mu}} \partial_{\bar{\nu}} V_{\bar{\mu}} \right),$$

onde derivando em relação a $\partial_\kappa V_{\mu'}$ obtemos $4F^{\kappa\mu'}$. Substituindo este resultado em [2.06] obtemos:

$$\frac{\partial L}{\partial(\partial_\kappa V_{\mu'})} = -F^{\kappa\mu'}. \quad [2.07]$$

Para o termo $\frac{\partial L}{\partial V_{\mu'}}$ teremos:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial V_{\mu'}} \left(-\bar{\varphi} \gamma_\mu g_\omega V^\mu \varphi + \frac{1}{2} m_\omega^2 V_\mu V^\mu \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial V_{\mu'}} \left(-\bar{\varphi} \gamma_\mu g_\omega g^{\mu\bar{\mu}} V_{\bar{\mu}} \varphi + \frac{1}{2} m_\omega^2 V_\mu g^{\mu\bar{\mu}} V_{\bar{\mu}} \right), \end{aligned}$$

e portanto:

$$\frac{\partial L}{\partial V_{\mu'}} = \left(-g_\omega \bar{\varphi} \gamma^{\mu'} \varphi + m_\omega^2 V^{\mu'} \right). \quad [2.08]$$

Inserindo os resultados [2.07] e [2.08] na equação [2.05] obtemos:

$$\partial_\nu F^{\nu\mu} + m_\omega^2 V^\mu = g_\omega \bar{\varphi} \gamma^\mu \varphi.$$

Esta equação nos dá a dinâmica do campo dos mésons vetoriais ômega, onde $B^\mu = \bar{\varphi} \gamma^\mu \varphi$ é a corrente bariônica.

Para $q_3 = \bar{\varphi}$ teremos:

$$\partial_{\mu} \left[\frac{\partial L}{\partial (\partial_{\mu} \bar{\varphi})} \right] - \frac{\partial L}{\partial \bar{\varphi}} = 0 ,$$

$$\rightarrow \frac{\partial L}{\partial (\partial_{\mu} \bar{\varphi})} = 0$$

$$\rightarrow \frac{\partial L}{\partial \bar{\varphi}} = \gamma_{\mu} i \partial^{\mu} \varphi - \gamma_{\mu} g_{\omega} V^{\mu} \varphi - (M - g_{\sigma} \phi) \varphi ,$$

e portanto:

$$[\gamma^{\mu} (i \partial_{\mu} - g_{\omega} V_{\mu}) - (M - g_{\sigma} \phi)] \varphi = 0 . \quad [2.09]$$

Esta é a equação de Dirac que nos dá a dinâmica do campo do nucleon, levando em conta a troca do méson sigma e ômega. A dinâmica dos campos dos mésons (sigma e ômega) e do campo dos nucleons é, então, descrita pelas equações abaixo:

$$\begin{aligned} (\partial_{\mu} \partial^{\mu} + m_{\sigma}^2) \phi &= g_{\sigma} \bar{\varphi} \varphi , \\ \partial_{\mu} F^{\mu\nu} + m_{\omega}^2 V^{\mu} &= g_{\omega} \bar{\varphi} \gamma^{\mu} \varphi , \\ [\gamma^{\mu} (i \partial_{\mu} - g_{\omega} V_{\mu}) - (M - g_{\sigma} \phi)] \varphi &= 0 . \end{aligned} \quad [2.10]$$

O ponto de partida para o formalismo de Hartree relativístico é a densidade Lagrangeana de campo médio, o qual é obtida a partir de [2.02], substituindo os operadores de campo dos mésons por campos clássicos. Então:

$$L_I = \bar{\varphi} [i \gamma_{\mu} \partial^{\mu} - g_{\omega} \gamma_0 V^0 - (M - g_{\sigma} \phi_0)] \varphi - \frac{1}{2} [(\nabla \phi_0)^2 + m_{\sigma}^2 \phi_0^2] + \frac{1}{2} [(\nabla V_0)^2 + m_{\omega}^2 V_0^2] .$$

Restringiremos nossa descrição a um núcleo esférico simétrico e portanto com momento angular total nulo. As equações de campo derivadas da Lagrangeana acima seguem imediatamente.

A equação de Dirac para o campo do nucleon é:

$$\{i\gamma_\mu \partial^\mu - g_\omega \gamma^0 V_0(r) - [M - g_\sigma \phi_0(r)]\} \varphi(x^\mu) = 0, \quad [2.11]$$

onde os campos dos mésons estão escritos como funções de posição, de acordo com a simetria esférica assumida. Aqui o campo do nucleon é ainda um operador e os campos de mésons são clássicos. Uma vez que [2.11] é linear, podemos escrever as soluções na forma de ondas planas $\varphi(x^\mu) = \varphi(x) \exp[-iEt]$. Assim:

$$h \psi(x) = E \psi(x),$$

onde,

$$h = [-i\vec{\alpha} \cdot \nabla - g_\omega V_0 + \beta(M - g_\sigma \phi_0)], \quad [2.12]$$

é o hamiltoniano de Dirac de partícula independente. De acordo com ref.[10] e ref.[1], a função de onda de partícula independente para um potencial central, o qual é o caso em questão, pode ser escrita na forma

$$\psi_\beta(x) = \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} \varphi_{\ell jm}(\hat{r}) \xi_{m_\xi}, \quad [2.13]$$

onde $G(r)$ (componente grande) e $F(r)$ (componente pequeno) compõem a parte radial da função de onda total, ξ_{m_ξ} é a função de isospin e os harmônicos esféricos vetoriais são definidos por

$$\varphi_{\ell jm}(\hat{r}) = \sum_{m_\ell} (\ell m_\ell \frac{1}{2} m_s | jm) Y_{\ell m_\ell}(\hat{r}) \chi_{m_s},$$

onde $Y_{\ell, m_\ell}(\hat{r})$ são os harmônicos esféricos e χ_{m_s} são as funções de spin. Detalhes adicionais para [2.13] serão apresentados no capítulo 4.

Capítulo 3

Funcional de Energia na Aproximação de Hartree p/ o Núcleo do ${}^4\text{He}$

Os operadores de campo dos nucleons serão expandidos em um conjunto completo de estados estacionários [11]:

$$\begin{aligned}\psi(x) &= \sum_{\lambda} [f_{\lambda}(\vec{x}) \exp(-iE_{\lambda}t) b_{\lambda} + g_{\lambda}(\vec{x}) \exp(iE_{\lambda}t) d_{\lambda}^{\dagger}], \\ \psi^{\dagger}(x) &= \sum_{\lambda} [f_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}) \exp(iE_{\lambda}t) b_{\lambda}^{\dagger} + g_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}) \exp(-iE_{\lambda}t) d_{\lambda}].\end{aligned}\quad [3.01]$$

Em [3.01], $f_{\lambda}(\vec{x})$ e $g_{\lambda}(\vec{x})$ são conjuntos completos de spinores de Dirac, b_{λ} e b_{λ}^{\dagger} representam os operadores de aniquilação e criação de nucleons no estado λ , e d_{λ} e d_{λ}^{\dagger} representam os operadores de aniquilação e criação para os correspondentes estados de anti-nucleons. Um vez que não vamos considerar a contribuição do mar de Dirac, a parte dos anti-nucleons será omitida daqui em diante nas expressões dadas por [3.01]. De acordo com Brockmann [1], o operador hamiltoniano em segunda quantização é dado por

$$\begin{aligned}H &= \sum_{\lambda\lambda'} \int \psi_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{x}) (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M) \psi_{\lambda}(\vec{x}) d^3x b_{\lambda'}^{\dagger} b_{\lambda} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda,\lambda',\beta,\beta'} \int \psi_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{x}_1) \psi_{\beta'}^{\dagger}(\vec{x}_2) V_{\lambda,\lambda'}(r) \psi_{\beta}(\vec{x}_2) \psi_{\lambda}(\vec{x}_1) d^3x_1 d^3x_2 b_{\lambda'}^{\dagger} b_{\beta'}^{\dagger} b_{\beta} b_{\lambda},\end{aligned}\quad [3.02]$$

onde $r = |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|$.

A notação de segunda quantização gerará automaticamente todos os termos de troca na expressão para o valor esperado do hamiltoniano. Assim, o valor esperado para a energia, ou seja,

$E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) \equiv \langle \psi | H | \psi \rangle$, será:

$$\begin{aligned}
 E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) &= \sum_{\lambda=1}^4 \int d^3 x' \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}')(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M)\psi_{\lambda}(\vec{x}') + \\
 &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} \int d^3 x_1 d^3 x_2 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}_1)\psi_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{x}_2)V_{\lambda, \lambda'}(r)\psi_{\lambda}(\vec{x}_1)\psi_{\lambda'}(\vec{x}_2) \\
 &- \underbrace{\frac{1}{2} \sum_{\lambda, \lambda'} \int d^3 x_1 d^3 x_2 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}_1)\psi_{\lambda'}^{\dagger}(\vec{x}_2)V_{\lambda, \lambda'}(r)\psi_{\lambda}(\vec{x}_2)\psi_{\lambda'}(\vec{x}_1)}_{\text{termo de troca}}
 \end{aligned} \tag{3.03}$$

Na aproximação de Hartree, o qual é o caso considerado, o termo de troca é descartado.

Desprezando-se o termo de troca e conseqüentemente a dependência na energia, o potencial presente em [3.02] [1],

$$\begin{aligned}
 V_{\lambda, \lambda'}(r) &= \frac{g_{\omega}^2}{4\pi} \gamma_0(1)\gamma_{\mu}(1)\gamma_0(2)\gamma^{\mu}(2) \frac{\exp\{-r[m_{\omega}^2 - (E_{\lambda} - E_{\lambda'})^2]\}^{\frac{1}{2}}}{r} + \\
 &- \frac{g_{\sigma}^2}{4\pi} \gamma_0(1)\gamma_0(2) \frac{\exp\{-r[m_{\sigma}^2 - (E_{\lambda} - E_{\lambda'})^2]\}^{\frac{1}{2}}}{r},
 \end{aligned}$$

assumirá a forma:

$$V(r) = \frac{g_{\omega}^2}{4\pi} \gamma_0(1)\gamma_{\mu}(1)\gamma_0(2)\gamma^{\mu}(2) \frac{\exp(-m_{\omega} r)}{r} - \frac{g_{\sigma}^2}{4\pi} \gamma_0(1)\gamma_0(2) \frac{\exp(-m_{\sigma} r)}{r}. \tag{3.04}$$

A função de onda para o estado fundamental é obtida tomando-se o determinante de Slater:

$$|\Phi\rangle = \prod_{\alpha=1}^4 b_{\alpha}^{\dagger}|0\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{4!}} \det(\psi_n),$$

onde ψ_n é o n -ésimo estado de partícula independente, o qual detalharemos no capítulo 4. Vamos observar que a equação de partícula independente surge da imposição de que a função de onda ψ_{λ} minimize o funcional de energia com a restrição de ψ_{λ} ser normalizada, ou seja, $\int d^3x \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x})\psi_{\lambda}(\vec{x}) = 1$. Portanto:

$$\tilde{E}(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) = E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) - \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} \int d^3x \psi_{\lambda}^{\dagger} \psi_{\lambda}, \quad [3.05]$$

onde ε_{λ} são os multiplicadores de Lagrange. O princípio variacional que determina ψ_{λ} pode ser escrito como:

$$\frac{\delta}{\delta \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}')} \tilde{E}(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) = 0.$$

Portanto, teremos:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}')} \tilde{E}(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) &= \\ &= \frac{\delta}{\delta \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}')} E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) - \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} \frac{\delta}{\delta \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}')} \int d^3x \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x})\psi_{\lambda}(\vec{x}) = 0. \end{aligned} \quad [3.06]$$

Para o cálculo da derivada funcional vamos usar a propriedade

$$\frac{\delta}{\delta \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}')} \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}) = \delta_{\lambda\beta} \delta(\vec{x}' - \vec{x}). \quad [3.07]$$

Desprezando-se o termo de troca em [3.03], obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\psi_{\beta}^{\dagger}(\bar{x}')} E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) &= \sum_{\lambda=1}^4 \int d^3x \frac{\delta}{\delta\psi_{\beta}^{\dagger}(\bar{x}')} \psi_{\lambda}^{\dagger}(\bar{x})(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M) \psi_{\lambda}(\bar{x}) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda=1}^4 \iint d^3x_1 d^3x_2 \frac{\delta}{\delta\psi_{\beta}^{\dagger}(\bar{x}')} \left\{ \psi_{\lambda}^{\dagger}(\bar{x}_1) \psi_{\lambda'}^{\dagger}(\bar{x}_2) V(|\bar{x}_1 - \bar{x}_2|) \psi_{\lambda}(\bar{x}_1) \psi_{\lambda'}(\bar{x}_2) \right\}. \end{aligned}$$

Usando a propriedade [3.07] obtemos:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\psi_{\beta}^{\dagger}(\bar{x}')} E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) &= (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M) \psi_{\beta}(\bar{x}') + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda'} \int d^3x_2 \psi_{\lambda'}^{\dagger}(\bar{x}_2) V(\bar{x} - \bar{x}_2) \psi_{\lambda'}(\bar{x}_2) \psi_{\beta}(\bar{x}') + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \int d^3x_1 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\bar{x}_1) V(\bar{x}_1 - \bar{x}) \psi_{\lambda}(\bar{x}_1) \psi_{\beta}(\bar{x}'), \end{aligned} \quad [3.08]$$

onde podemos observar que as integrais tornaram-se independentes. Trocando as variáveis mudas, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta\psi_{\beta}^{\dagger}(\bar{x}')} E(\psi_{\lambda}^{\dagger}, \psi_{\lambda}) &= (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M) \psi_{\beta}(\bar{x}') + \\ &+ \sum_{\lambda} \int d^3x_1 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\bar{x}_1) V(\bar{x} - \bar{x}_1) \psi_{\lambda}(\bar{x}_1) \psi_{\beta}(\bar{x}'). \end{aligned}$$

Para o segundo termo em [3.06] temos:

$$\sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda} \int d^3x \frac{\delta}{\delta\psi_{\beta}^{\dagger}(\bar{x}')} (\psi_{\lambda}^{\dagger}(\bar{x}) \psi_{\lambda}(\bar{x})) = \varepsilon_{\beta} \psi_{\beta}(\bar{x}').$$

Rescrevendo [3.08] obtemos:

$$\begin{aligned}
 0 = & (\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M) \psi_{\beta}(\vec{x}) + \\
 & + \sum_{\lambda} \int d^3 x_1 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}_1) V(|\vec{x} - \vec{x}_1|) \psi_{\lambda}(\vec{x}_1) \psi_{\beta}(\vec{x}) + \\
 & - \varepsilon_{\beta} \psi_{\beta}(\vec{x}) .
 \end{aligned}$$

Definindo

$$\bar{V}(\vec{x}) = \sum_{\lambda} \int d^3 x_1 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}_1) V(|\vec{x} - \vec{x}_1|) \psi_{\lambda}(\vec{x}_1) \psi_{\beta}(\vec{x}) , \quad [3.09]$$

podemos escrever

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta M + \bar{V}(\vec{x})) \psi_{\beta}(\vec{x}) = \varepsilon_{\beta} \psi_{\beta}(\vec{x}) , \quad [3.10]$$

$$h \psi_{\beta}(\vec{x}) = \varepsilon_{\beta} \psi_{\beta}(\vec{x}) .$$

A expressão acima é a equação de Dirac de partícula independente, onde a auto-consistência para o potencial pode ser claramente observada em [3.09]. Vamos procurar uma solução aproximada para [3.10] usando o método variacional de ponto-de-sela, adequado a descrição do núcleo do ${}^4\text{He}$.

Capítulo 4

Função de Onda de Partícula Independente para o Estado $1s_{1/2}$

A função de onda de partícula independente deve ser solução da equação de Dirac [3.10], onde a forma geral no caso de um potencial central é usualmente dada por [2.13]. Assim:

$$\psi_{\beta}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \sigma \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} \varphi_{\ell j m} \xi_{m_{\xi}}, \quad [4.01]$$

onde o índice β representa o conjunto de números quânticos $(n, \ell, m_{\ell}, m_s, m_{\xi})$ que caracterizam o sistema e \vec{x} é o vetor posição (em nossa descrição adotaremos o sistema esférico). O número quântico principal n está implícito nas funções $G(r)$ (componente grande) e $F(r)$ (componente pequeno), como veremos posteriormente. Vamos admitir a condição de normalização dada por

$$\int d^3x \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\beta}(\vec{x}) = 1, \quad [4.02]$$

onde d^3x é o elemento de volume. As funções de spin e isospin são normalizadas, ou seja:

$$\begin{aligned} \chi_{m_s}^{\dagger} \chi_{m_s} &= 1 \\ \xi_{m_{\xi}}^{\dagger} \xi_{m_{\xi}} &= 1, \end{aligned} \quad [4.03]$$

com $m_s = \pm 1/2$ e $m_{\xi} = \pm 1/2$

Para o estado fundamental do núcleo de ${}^4\text{He}$ com os quatro estados ocupados temos, na aproximação de Hartree relativística

$$\psi_{\beta}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \sigma \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_{\xi}} . \quad [4.04]$$

Para o cálculo da norma utilizamos a condição dada por [4.02]. Em coordenadas esféricas teremos:

$$\int_0^{\infty} r^2 dr \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\beta}(\vec{x}) d\phi = 1 ,$$

$$\int_0^{\infty} 4\pi r^2 dr \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\beta}(\vec{x}) = 1 ,$$

e levando em conta [4.03] e [4.04] teremos

$$\int d^3x \psi_{\beta}^{\dagger}(\vec{x}) \psi_{\beta}(\vec{x}) = \int d^3x \left(-i \frac{G(r)}{r} , \sigma \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \right) \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \chi_{m_s}^{\dagger} \xi_{m_{\xi}}^{\dagger} \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \sigma \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \chi_{m_s} \xi_{m_{\xi}} ,$$

$$= \int_0^{\infty} 4\pi r^2 dr \left(\frac{G(r)^2}{r^2} + \frac{F(r)^2}{r^2} \right) \frac{1}{4\pi} .$$

Portanto, a condição de normalização para o estado fundamental do ${}^4\text{He}$ no sistema de coordenadas esféricas é dada por:

$$\int_0^{\infty} dr \left(G(r)^2 + F(r)^2 \right) = 1 . \quad [4.05]$$

Agora vamos utilizar a forma da função de onda dada por [4.04] para calcularmos os termos da equação de Dirac dada por [3.10].

→ Termo Cinético:

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\psi_{\beta}(\vec{x}) = (\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_s}.$$

As matrizes $\vec{\alpha}$ são dadas por $\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$, onde $\vec{\sigma}(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ são as matrizes de Pauli. Assim:

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\psi_{\beta}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} (\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \hat{r}) \frac{F(r)}{r} \\ i \vec{\sigma} \cdot \vec{p} \frac{G(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_s}.$$

Aqui vamos usar as propriedades [9]

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p}) f(r) \varphi_{\ell j m}(\hat{r}) = \frac{1}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r} f(r) + \frac{1}{r} (1+k) f(r) \right] (\vec{\sigma} \cdot \hat{r}) \varphi_{\ell j m}(\hat{r}),$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{p})(\vec{\sigma} \cdot \hat{r}) f(r) \varphi_{\ell j m}(\hat{r}) = \frac{1}{i} \left[\frac{\partial}{\partial r} f(r) + \frac{1}{r} (1-k) f(r) \right] \varphi_{\ell j m}(\hat{r}),$$

onde

$$k = \begin{cases} -(j + 1/2) \rightarrow j = \ell + 1/2 \\ (j + 1/2) \rightarrow j = \ell - 1/2 \end{cases},$$

lembrando que para o caso em questão temos $\ell = 0$, $j = 1/2$ e portanto $k = -1$. Assim obtemos:

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p})\psi_{\beta}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} \frac{1}{i} \left[\frac{d}{dr} \frac{F(r)}{r} + \frac{2}{r} \frac{F(r)}{r} \right] \\ \frac{d}{dr} \frac{G(r)}{r} \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_s}. \quad [4.06]$$

Podemos escrever a [4.06] em uma forma mais conveniente, bastando para isto efetuarmos as derivadas radiais.

$$\frac{d}{dr} \frac{F(r)}{r} + \frac{2F(r)}{r} = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) F(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} F(r) + \frac{2F(r)}{r} = \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} F(r) + \frac{F(r)}{r} \right), \quad [4.07]$$

$$\frac{d}{dr} \frac{G(r)}{r} = \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{r} \right) G(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} G(r) = \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} G(r) - \frac{G(r)}{r} \right). \quad [4.08]$$

Usando [4.07] e [4.08] em [4.06] obtemos a expressão para o termo cinético. Assim:

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p}) \psi_{\beta}(\vec{x}) = \left(\begin{array}{c} \frac{1}{i} \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} F(r) + \frac{F(r)}{r} \right) \\ \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} G(r) - \frac{G(r)}{r} \right) \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \end{array} \right) Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_s}. \quad [4.09]$$

→ Termo de Massa:

$$\beta M \psi_{\beta}(\vec{x}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} M \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_s} = \begin{pmatrix} iM \frac{G(r)}{r} \\ -M \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_s}. \quad [4.10]$$

Para o cálculo do termo de potencial é conveniente separá-lo nas partes escalar e vetorial, ou seja, $V = V_S + V_V$.

→ Termo do Potencial Escalar:

$$V_S \psi_{\beta}(\vec{x}) = \sum_{\lambda=1}^4 \int d^3 x_1 \psi_{\lambda}^{\dagger}(\vec{x}_1) \left(-\frac{g_{\sigma}^2}{4\pi} \gamma_0(1) \frac{e^{-m_{\sigma} |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|} \right) \gamma_0 \psi_{\lambda}(\vec{x}_1) \psi_{\beta}(\vec{x}),$$

onde $|\vec{x}_1| = r_1$. Aqui lembramos que $\gamma_0(1)$ atua em $\psi_{\lambda}(\vec{x}_1)$ e γ_0 atua em $\psi_{\beta}(\vec{x})$.

Então:

$$\begin{aligned}
V_S \psi_\beta(x) &= -4 \frac{g_\sigma^2}{4\pi} \int d^3x_1 \psi_\lambda^\dagger(\vec{x}_1) \gamma_0(1) \psi_\lambda(\vec{x}_1) \frac{e^{-m_\sigma |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|} \gamma_0 \psi_\beta(\vec{x}) \\
&= -\frac{g_\sigma^2}{\pi} \int \frac{dx_1^3}{4\pi} \left(\frac{G(r_1)^2}{r_1^2} - \frac{F(r_1)^2}{r_1^2} \right) \frac{e^{-m_\sigma |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|} \times \\
&\quad \times \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i \frac{G(r)}{r} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_\xi},
\end{aligned}$$

onde vamos escrever o potencial escalar auto-consistente como

$$V_S(\vec{x}) = -\frac{g_\sigma^2}{\pi} \int \frac{dx_1^3}{4\pi} \left(\frac{G(r_1)^2}{r_1^2} - \frac{F(r_1)^2}{r_1^2} \right) \frac{e^{-m_\sigma |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|}, \quad [4.11]$$

com $|\vec{x}| = r$. Assim:

$$V_S \psi_\beta(\vec{x}) = \begin{pmatrix} V_S(\vec{x}) i \frac{G(r)}{r} \\ -V_S(\vec{x}) \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{pmatrix} Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_\xi}. \quad [4.12]$$

→ Termo Direto do Potencial Vetor:

No termo direto do potencial vetor temos a expressão $\gamma_0(1)\gamma_\mu(1)\gamma_0\gamma^\mu$, onde γ_μ são as matrizes de Dirac definidas no apêndice 3. Desenvolvendo obtemos:

$$\gamma_0(1)\gamma_\mu(1)\gamma_0\gamma^\mu = \gamma_0(1)\gamma_0(1)\gamma_0\gamma^0 + \gamma_0(1)\gamma_1(1)\gamma_0\gamma^1 + \gamma_0(1)\gamma_2(1)\gamma_0\gamma^2 + \gamma_0(1)\gamma_3(1)\gamma_0\gamma^3. \quad [4.13]$$

Podemos rescrever [4.13] na forma

$$\gamma_0(\mathbf{1})\gamma_0(\mathbf{1})\gamma_0 g^{00}\gamma_0 + \sum_{k=1}^3 \gamma_0(\mathbf{1})\gamma_k(\mathbf{1})\gamma_0 g^{kk}\gamma_k = V_V' + V_V''.$$

Aqui usamos $\gamma^\mu = g^{\mu\nu}\gamma_\nu$ onde $g^{\mu\nu}$ é a métrica, definida por

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Assim:

$$V_V' = \gamma_0(\mathbf{1})\gamma_0(\mathbf{1})\gamma_0 g^{00}\gamma_0,$$

$$V_V'' = \gamma_0(\mathbf{1})\gamma_1(\mathbf{1})\gamma_0 g^{11}\gamma_1 + \gamma_0(\mathbf{1})\gamma_2(\mathbf{1})\gamma_0 g^{22}\gamma_2 + \gamma_0(\mathbf{1})\gamma_3(\mathbf{1})\gamma_0 g^{33}\gamma_3.$$

Desenvolvendo o termo V_V' obtemos

$$V_V' = \gamma_0^2(\mathbf{1}) \times \gamma_0^2 = \mathbf{1}(\mathbf{1}) \times \mathbf{1},$$

onde $\mathbf{1}(\mathbf{1})$ é a matriz unitária que atua na partícula de coordenadas com índice $\mathbf{1}$. A contribuição de V_V'' para a energia (no caso em questão) é nula, ou seja, $\langle V_V'' \rangle = 0$. Portanto, o termo direto do potencial vetor será

$$V_V \psi_\beta(\vec{x}) = \sum_{\lambda=1}^4 \int d^3x_1 \psi_\lambda^\dagger(\vec{x}_1) \left(\frac{g_\omega^2 e^{-m_\omega |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{4\pi |\vec{x}_1 - \vec{x}|} \right) \gamma_0 \psi_\lambda(\vec{x}_1) \psi_\beta(\vec{x}).$$

Então:

$$\begin{aligned}
 V_V \psi_\beta(\vec{x}) &= 4 \frac{g_\omega^2}{4\pi} \int d^3 x_1 \psi_\lambda^\dagger(\vec{x}_1) \psi_\lambda(\vec{x}_1) \frac{e^{-m_\omega |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|} \psi_\beta(\vec{x}) \\
 &= \frac{g_\omega^2}{\pi} \int \frac{dx_1^3}{4\pi} \left(\frac{G(r_1)^2}{r_1^2} + \frac{F(r_1)^2}{r_1^2} \right) \frac{e^{-m_\omega |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|} \times \\
 &\quad \times \left(\begin{array}{c} i \frac{G(r)}{r} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{array} \right) Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_\xi}.
 \end{aligned}$$

Aqui vamos escrever o potencial vetor auto-consistente como

$$V_V(\vec{x}) = \frac{g_\omega^2}{\pi} \int \frac{d^3 x_1}{4\pi} \left(\frac{G(r_1)^2}{r_1^2} + \frac{F(r_1)^2}{r_1^2} \right) \frac{e^{-m_\omega |\vec{x}_1 - \vec{x}|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}|}. \quad [4.17]$$

Então,

$$V_V(\vec{x}) \psi_\beta(\vec{x}) = \left(\begin{array}{c} V_V(\vec{x}) i \frac{G(r)}{r} \\ V_V(\vec{x}) \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{array} \right) Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_\xi}. \quad [4.18]$$

Rescrevendo a equação de Dirac de partícula independente dada por [3.10], usando os resultados [4.09], [4.10], [4.12] e [4.18]. Obtemos então:

$$\begin{aligned}
 &\left(\begin{array}{c} \frac{1}{i} \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} F(r) + \frac{F(r)}{r} \right) + iM \frac{G(r)}{r} + V_s(\vec{x}) i \frac{G(r)}{r} + V_V(\vec{x}) i \frac{G(r)}{r} \\ \frac{1}{r} \left(\frac{d}{dr} G(r) - \frac{G(r)}{r} \right) \vec{\sigma} \cdot \hat{r} - M \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} - V_s(\vec{x}) \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} + V_V(\vec{x}) \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{array} \right) Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_\xi} = \\
 &= \varepsilon_\beta \left(\begin{array}{c} i \frac{G(r)}{r} \\ \vec{\sigma} \cdot \hat{r} \frac{F(r)}{r} \end{array} \right) Y_{00}(\hat{r}) \chi_{m_s} \xi_{m_\xi}.
 \end{aligned}$$

A equação anterior pode ser escrita como:

$$\begin{aligned}
 -\frac{dF(r)}{dr} - \frac{F(r)}{r} + (M + V_s + V_v)G(r) &= \varepsilon_\beta G(r), \\
 \frac{dG(r)}{dr} - \frac{G(r)}{r} - (M + V_s - V_v)F(r) &= \varepsilon_\beta F(r).
 \end{aligned}
 \tag{4.19}$$

Então a forma matricial equivalente para o sistema de equações [4.19] é:

$$\begin{aligned}
 \begin{pmatrix} 0 & -\frac{d}{dr} \\ \frac{d}{dr} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} + \frac{1}{r} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} (M+V_s) & 0 \\ 0 & -(M+V_s) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} V_v & 0 \\ 0 & V_v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} &= \varepsilon \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}, \\
 -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \frac{d}{dr} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} - \frac{1}{r} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} (M+V_s) \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} V_v \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} &= \varepsilon \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}, \\
 -i\sigma_2 \frac{d}{dr} \Phi - \frac{\sigma_1}{r} \Phi + \sigma_3 (M + V_s) \Phi + 1V_v \Phi &= \varepsilon \Phi,
 \end{aligned}$$

onde usamos $\psi = \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix}$ e σ_i são as matrizes de Pauli. Definindo o operador

$$H = -i\sigma_2 \frac{d}{dr} - \frac{\sigma_1}{r} + \sigma_3 (M + V_s) + 1V_v,
 \tag{2.20}$$

obtemos a equação matricial equivalente para [4.19]

$$H \psi = \varepsilon \psi.
 \tag{4.21}$$

Agora, vamos obter os elementos de matriz para este hamiltoniano.

Capítulo 5

Cálculo dos elementos de Matriz para o Estado $1s_{1/2}$

Em nossa descrição vamos tomar uma base formada por auto-estados do oscilador harmônico tridimensional. Então:

$$\psi = \begin{pmatrix} G \\ F \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} \sum_{m=0}^M x_m \varphi_m \\ \sum_{n=0}^N y_n \chi_n \end{pmatrix}, \quad [5.01]$$

onde φ_m e χ_n são auto-estados normalizados do oscilador harmônico tridimensional e m, n especificam a dimensão da base. De forma equivalente teremos

$$\psi = \sum_{m=0}^M x_m \varphi_m |\uparrow\rangle + \sum_{n=0}^N y_n \chi_n |\downarrow\rangle, \quad [5.02]$$

onde $|\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ e $|\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$.

Usando [5.02] em [4.21] obtemos

$$\begin{aligned} \left(-i\sigma_2 \frac{d}{dr} - \frac{\sigma_1}{r} + \sigma_3 (M + V_S) + 1V_V \right) \left(\sum_{m=0}^M x_m \varphi_m |\uparrow\rangle + \sum_{n=0}^N y_n \chi_n |\downarrow\rangle \right) = \\ = \varepsilon \left(\sum_{m=0}^M x_m \varphi_m |\uparrow\rangle + \sum_{n=0}^N y_n \chi_n |\downarrow\rangle \right). \end{aligned} \quad [5.03]$$

Usando a forma do operador H definida por [4.20], obtemos os elementos de matriz. Os detalhes matemáticos estão feitos no apêndice 2, Seção 1. A equação matricial é:

$$\begin{pmatrix} M + V_S + V_V & W \\ W^T & -(M + V_S - V_V) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}, \quad [5.04]$$

onde

$$\begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} x_0 \\ \vdots \\ x_M \\ y_0 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned} (M + V_S + V_V)_{m,n} &\equiv \langle \varphi_m | M + V_S + V_V | \varphi_n \rangle, \\ (M + V_S - V_V)_{m,n} &\equiv \langle \chi_m | M + V_S - V_V | \chi_n \rangle, \end{aligned} \quad [5.05]$$

$$(W)_{m,n} \equiv \langle \varphi_m | -\frac{d}{dr} - \frac{1}{r} | \chi_n \rangle,$$

$$(W^T)_{m,n} \equiv \langle \chi_m | \frac{d}{dr} - \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle.$$

onde M é a massa do nucleon, V_S é o potencial escalar definido por [4.11], V_V é o potencial vetorial definido por [4.17] e W é o termo cinético, explícito na expressão acima. As funções radiais, φ_m e χ_n , são auto-estados do oscilador harmônico tridimensional definidas no apêndice 1.

Assim, de acordo com [A1.04] (lê-se apêndice 1, equação 4) e [A1.05], teremos.

$$\begin{aligned}\varphi_m(r) &= u_{m,\ell=0}(r) = A_{n,\ell=0} r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} \sum_{i=0}^n k_i^0 (-1)^i (a^2 r^2)^i \\ \chi_n(r) &= u_{n,\ell=1}(r) = B_{n,\ell=1} r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} \sum_{j=0}^n k_j^1 (-1)^j (a^2 r^2)^j,\end{aligned}\quad [5.06]$$

onde $k_i^\ell = \frac{\Gamma(n + \ell + \frac{3}{2})}{i!} \binom{n + \ell + \frac{1}{2}}{n - i}$.

A constante α em [5.06] define o inverso do comprimento do oscilador. Em nossa descrição tomaremos “ α ” como o parâmetro variacional não linear. Abaixo estão os resultados dos elementos de matriz dados por [5.05]. Os detalhes matemáticos estão no apêndice 2, seção 2. As normas A_m e B_n são dadas por

$$A_m = \sqrt{\frac{2\alpha^3 m!}{\Gamma(m + \frac{3}{2})^3}}, \quad B_m = \sqrt{\frac{2\alpha^5 m!}{\Gamma(m + \frac{5}{2})^3}}. \quad [5.07]$$

Para os termos $\langle \varphi_m | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle$ e $\langle \chi_m | \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle$ teremos:

$$\langle \varphi_m | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle = \frac{A_m B_n}{2\alpha^3} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right),$$

$$\langle \chi_m | \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle = \frac{B_m A_n}{2\alpha^3} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^1 k_j^0 (-1)^{i+j} \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right).$$

Para os termos $\langle \varphi_m | d/dr | \chi_n \rangle$ e $\langle \chi_m | d/dr | \varphi_n \rangle$ teremos:

$$\langle \varphi_m | d/dr | \chi_n \rangle = \frac{A_m B_n}{2(a^2)^{3/2}} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} (j-i+1/2) \Gamma(3/2+i+j),$$

$$\langle \chi_m | d/dr | \varphi_n \rangle = \frac{B_m A_n}{2(a^2)^{3/2}} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^1 k_j^0 (-1)^{i+j} (j-i-1/2) \Gamma(3/2+i+j).$$

Os termos $\langle \varphi_m | V_S | \varphi_n \rangle$, $\langle \varphi_m | V_V | \varphi_n \rangle$, $\langle \chi_m | V_S | \chi_n \rangle$ e $\langle \chi_m | V_V | \chi_n \rangle$ são dados abaixo:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | V_S | \varphi_n \rangle = & -\frac{A_m A_n g_\sigma^2}{\pi} \times \\ & \times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^0 k_j^0 k_\alpha^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{i+j,\alpha'+\beta'}^\sigma + \right. \\ & \left. - \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^0 k_j^0 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{i+j,\mu'+\nu'}^\sigma \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | V_V | \varphi_n \rangle = & +\frac{A_m A_n g_\omega^2}{\pi} \times \\ & \times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^0 k_j^0 k_\alpha^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{i+j,\alpha'+\beta'}^\omega + \right. \\ & \left. + \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^0 k_j^0 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{i+j,\mu'+\nu'}^\omega \right\}. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \langle \chi_m | V_S | \chi_n \rangle = & -\frac{B_m B_n g_\sigma^2}{\pi} \times \\ & \times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^1 k_j^1 k_\alpha^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{2+i+j,\alpha+\beta}^\sigma + \right. \\ & \left. - \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^1 k_j^1 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{2+i+j,\mu'+\nu'}^\sigma \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \chi_m | V_V | \chi_n \rangle = & + \frac{B_m B_n g_\sigma^2}{\pi} \times \\
& \times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^1 k_j^1 k_{\alpha'}^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_{\alpha} x_{\beta} A_{\alpha} A_{\beta} \times I_{2+i+j, \alpha+\beta}^{\sigma} + \right. \\
& \left. + \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^1 k_j^1 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_{\mu} y_{\nu} B_{\mu} B_{\nu} \times I_{2+i+j, \mu'+\nu'}^{\sigma} \right\}.
\end{aligned}$$

onde a integral $I_{s,t}^{\eta}$, que aparece nas expressões acima, é dada por

$$I_{s,t}^{\eta} \equiv \int \frac{d^3 x_1}{4\pi} \int \frac{d^3 x_2}{4\pi} r_1^{2s} e^{-\beta^2 r_1^2} r_2^{2t} e^{-\beta^2 r_2^2} \frac{e^{-M_{\eta} r}}{r},$$

e sua solução está detalhada no apêndice 2, seção 3.

Note que os elementos de matriz dos potenciais (escalar e vetorial) dependem dos coeficientes x_m e y_n , o que indica a necessidade do cálculo auto-consistente. O passo seguinte será obter numericamente os elementos de matriz e então diagonalizarmos a matriz [5.04]. Os detalhes dos procedimentos numéricos estão descritos mais claramente no capítulo 6.

Capítulo 6

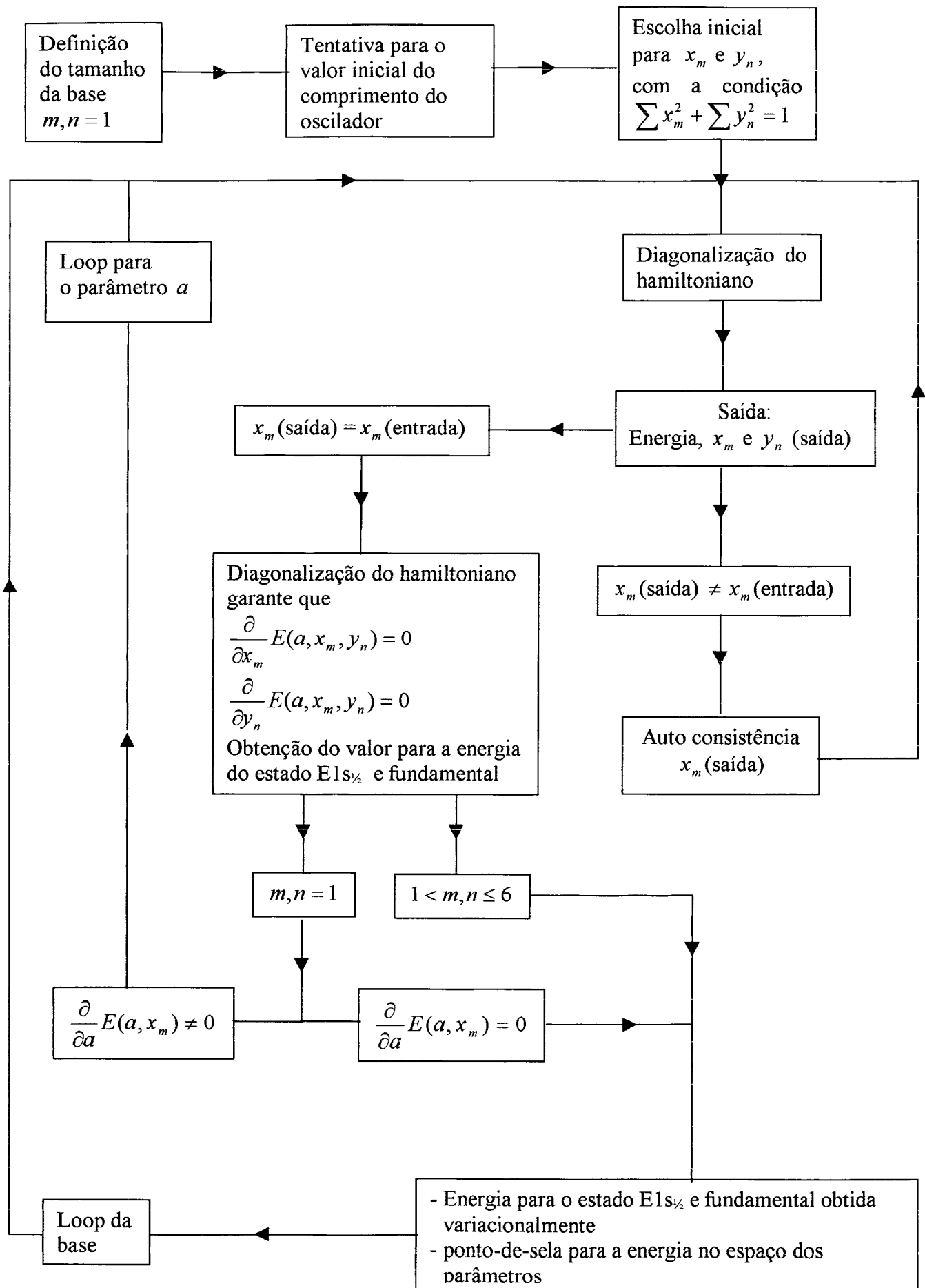
Tabela de Parâmetros e Algoritmo Numérico

A tabela abaixo fornece os valores para os parâmetros utilizados na rotina numérica, os quais são os mesmos utilizados pelo código TIMORA, com exceção do inverso do comprimento do oscilador, “ a ”, que é determinado variacionalmente.

Parâmetro	Valor (MeV)
Massa do Nucleon	939,000
Massa do méson escalar	520,000
Massa do méson vetorial	783,000
Acoplamento g_σ	10,470
Acoplamento g_ω	13,800
Inverso do comprimento do oscilador (a)	126,288

Tab. 6.1 – Valores atribuídos aos parâmetros utilizados na rotina numérica.

Um dos parâmetros variacionais é tomado como o inverso do comprimento do oscilador harmônico, definido no apêndice 1 como $a = \sqrt{\frac{m \omega}{\hbar}}$, o qual aparece explicitamente nos elementos de matriz calculados no capítulo 5. O outro parâmetro variacional escolhido é o coeficiente x_m da expansão, também definido no capítulo 5, dados por [5.01]. Devemos observar que a escolha de x_m tem que satisfazer o vínculo $\sum_m x_m^2 + \sum_n y_n^2 = 1$. Quando efetuamos a diagonalização do hamiltoniano escolhemos (dentre os estados de energia positiva) o de menor energia. O cálculo do mínimo em relação ao parâmetro não linear, a (inverso do comprimento do oscilador), mostrou pouca dependência com a dimensão das bases ϕ_m e χ_n . Por este motivo, nos resultados apresentados no capítulo seguinte, o valor de a usado foi calculado no caso onde a dimensão das bases ϕ_m e χ_n eram iguais a unidade. Isto pode ser verificado no algoritmo abaixo representado. Em linhas gerais, o procedimento numérico é efetuado de acordo com o esquema que segue.



Capítulo 7

Análise dos Resultados e Conclusões

Para o nosso problema, escolhemos as soluções do oscilador harmônico tridimensional, cujas funções são os Polinômios de Laguerre. Os parâmetros variacionais são tomados como sendo o inverso do comprimento do oscilador (chamado parâmetro não linear) e os coeficientes x_m e y_n da expansão de $G(r)$ e $F(r)$, dados por [5.01], chamados parâmetros lineares.

Para testarmos a confiabilidade do método SPV é necessário que possamos comparar os resultados obtidos a partir dele, com resultados obtidos por outros processos, para o mesmo problema. A descrição para o estado fundamental do ^4He foi obtida através do código Timora. Através deste código se obtém a solução numérica para o sistema de equações diferenciais acopladas [4.19]. Os resultados obtidos a partir deste método serão tomados como referência para avaliar os resultados obtidos pelo método SPV.

Primeiramente vamos comparar as características da solução obtida pelo TIMORA com as soluções obtidas pelo SPV. Numericamente, testamos bases com dimensão de 1 até 6, onde obtivemos uma boa convergência. Deve-se observar que uma base com dimensão 1 significa um termo para o componente grande, $G(r)$, e um termo para o componente pequeno, $F(r)$. Nas figuras que seguem, as linhas cheias representam a solução obtida pelo código TIMORA e as linhas pontilhadas representam a solução obtida pelo SPV. As figuras, 7.1-a e 7.1-b, mostram o comportamento dos componentes, grande e pequeno, representadas em uma base com dimensão 1. Embora o comportamento qualitativo seja razoável para os dois componentes, notamos uma leve modificação no pico, em torno de $r = 1,5 \text{ fm}$, e acentuadas modificações em torno de $r = 5 \text{ fm}$ para o componente grande. O componente pequeno apresenta um comportamento com diferenças mais acentuadas com relação a função de onda exata (Timora).

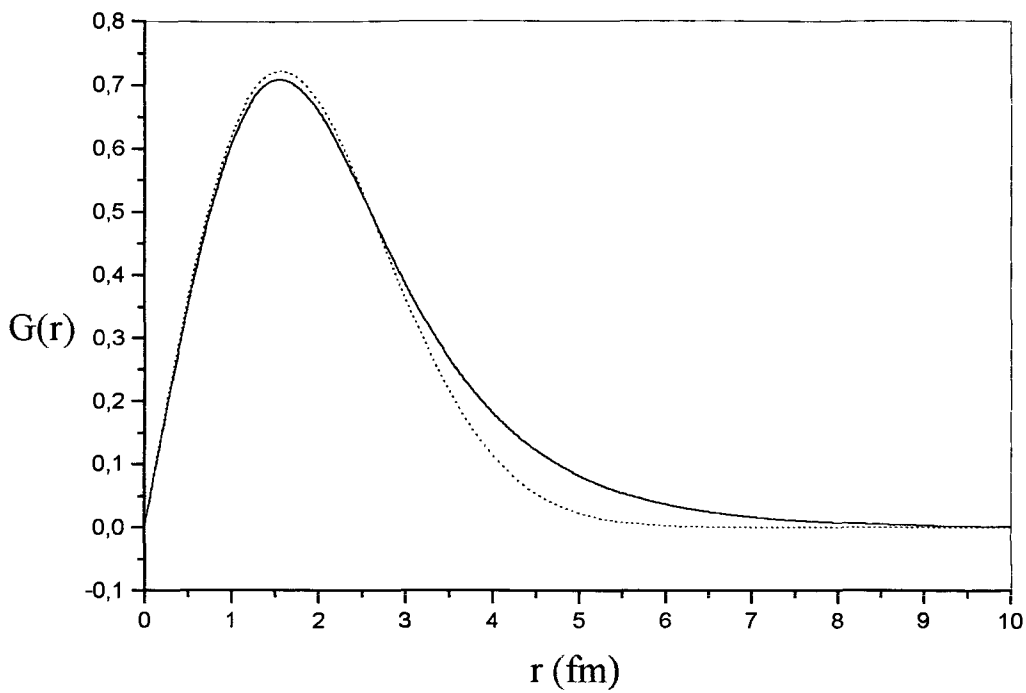


Fig. 7.1-a – Gráfico comparativo entre o componente grande obtido pelo Timora e SPV (1x1).

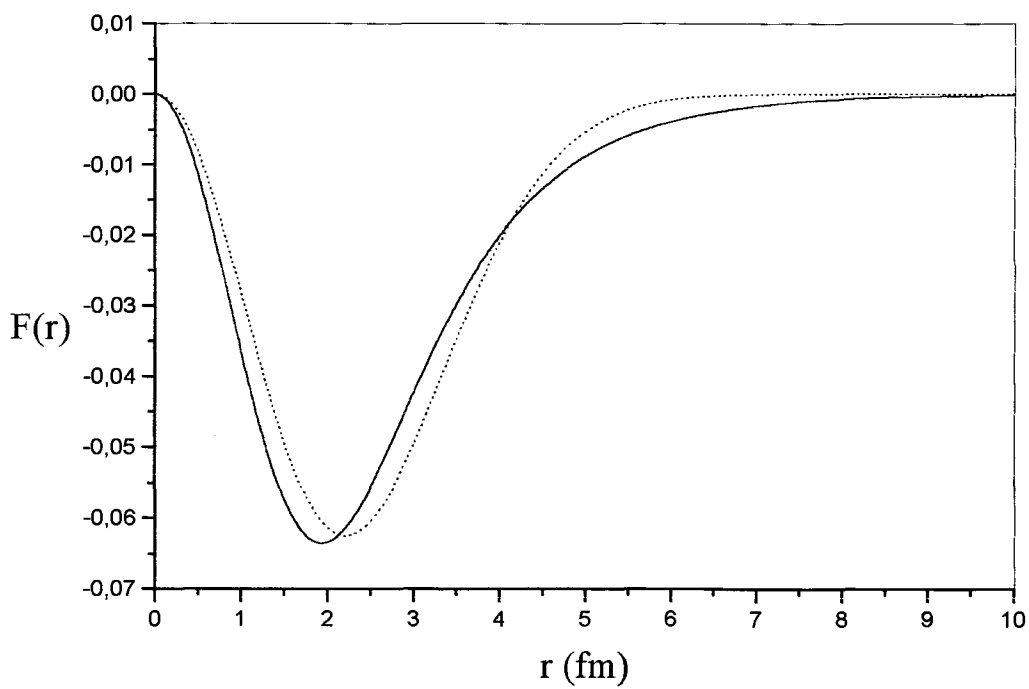


Fig. 7.1-b – Gráfico comparativo entre o componente pequeno obtido pelo Timora e SPV (1x1).

Na tabela 7.1, abaixo, estão mostrados alguns valores que mostram os desvios da solução obtida pelo SPV em relação a solução obtida pelo código Timora. Como podemos observar, a região em torno do pico está sensivelmente deslocada e o mesmo acontece para a região em torno de $r = 5 fm$. Este comportamento contribui substancialmente para um resultado pouco satisfatório para o valor da energia (o que pode ser observado na tabela 7.4).

G (r)			F (r)		
Componente Grande			Componente Pequena		
r (fm)	Timora	SPV (1x1)	r (fm)	Timora	SPV (1x1)
1,50	0,70779	0,72130	0,50	-0,01144	-0,00826
1,55	0,70861	0,72250	1,00	-0,03652	-0,02834
1,60	0,70794	0,72210	2,00	-0,06330	-0,06133
5,50	0,05527	0,00855	3,00	-0,04229	-0,04956
6,00	0,03701	0,00287	4,00	-0,01997	-0,02101
6,50	0,02478	0,00086	5,00	-0,00873	-0,00520
7,00	0,01659	0,00023	6,00	-0,00380	-0,00078
7,50	0,01110	0,00005	7,00	-0,00166	-0,00007
8,00	0,00743	0,00001	8,00	-0,00073	-0,00004

Tab. 7.1 – Valores comparativos entre as soluções obtidas pelo código Timora e SPV (1x1) para os componentes grande e pequeno.

Nas figuras 7.2-a e 7.2-b, observamos os componentes, grande e pequeno, tomados com 4 elementos na base. Como podemos observar, o comportamento da solução obtida pelo código Timora já é bem reproduzido, apresentando uma sutil variação entre $r = 5,0 fm$ e $r = 9,0 fm$. Podemos observar que na região do pico já temos um bom comportamento. Isto se reflete no valor esperado para a energia do estado fundamental que já apresenta boa concordância com o valor exato. O componente pequeno ainda apresenta suaves modificações no pico, em torno de $r = 2,0 fm$, e também entre $r = 5,0 fm$ e $r = 9,0 fm$.

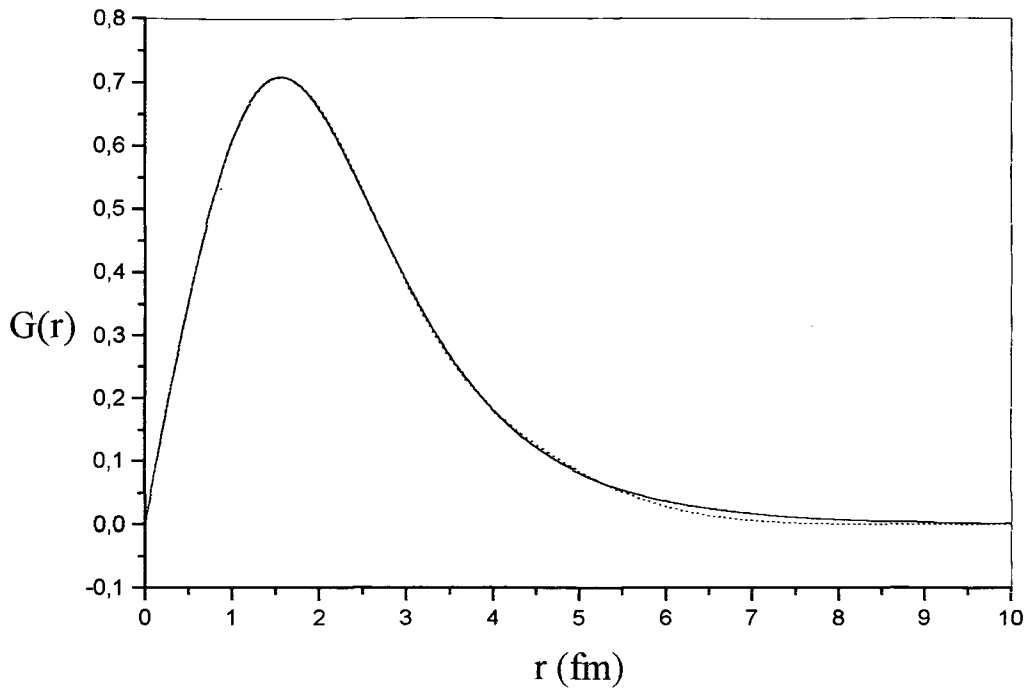


Fig. 7.2-a – Gráfico comparativo entre o componente grande obtido pelo Timora e SPV (4x4).

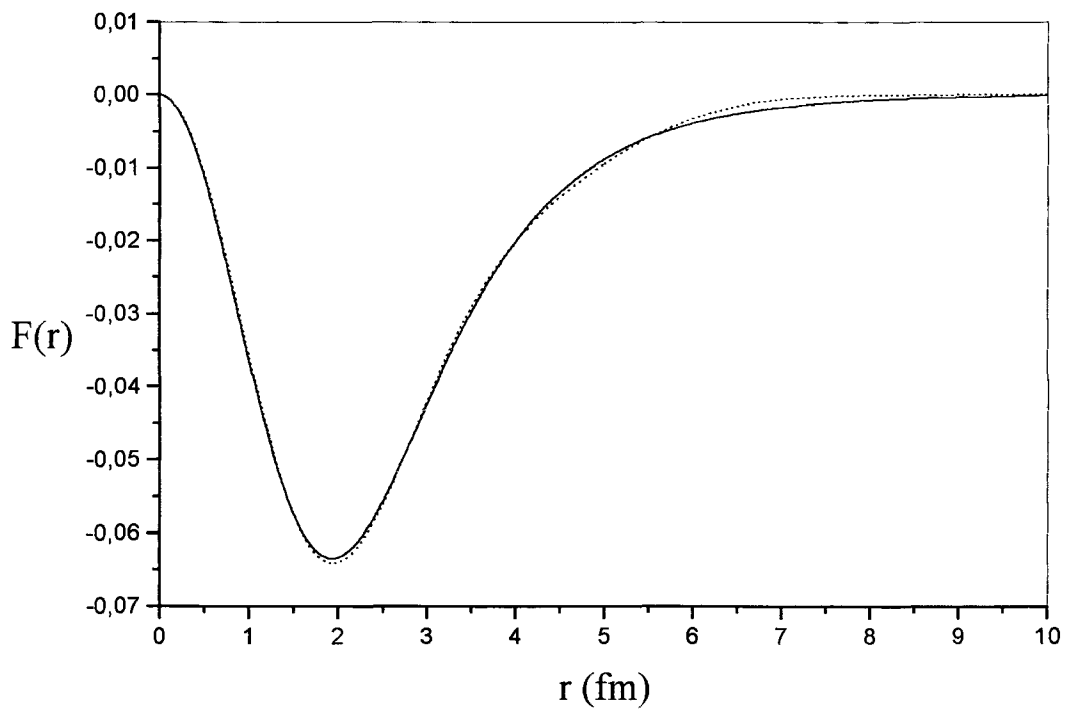


Fig. 7.2-b – Gráfico comparativo entre a componente pequeno obtido pelo Timora e SPV (4x4).

Conforme podemos observar através da tabela 7.2, o pico do componente grande, expandido com 4 elementos na base, já se apresenta bem comportado; a leve modificação observada na região além de $r = 5 fm$ não afeta drasticamente o valor da energia (ver tabela 4). O componente pequeno ainda apresenta o pico levemente deslocado e também há uma considerável variação além de $r = 6 fm$.

G (r) Componente Grande			F (r) Componente Pequena		
r (fm)	Timora	SPV (4x4)	r (fm)	Timora	SPV (4x4)
1,50	0,70779	0,70690	1,50	0,05743	0,05748
1,55	0,70861	0,70800	1,80	0,06291	0,06343
1,60	0,70794	0,70770	2,00	0,06330	0,06400
5,00	0,08248	0,08489	2,20	0,06145	0,06216
5,50	0,05527	0,05214	5,00	0,00873	0,00937
6,00	0,03701	0,02855	6,00	0,00380	0,00318
7,00	0,01659	0,00580	7,00	-0,00166	-0,00064
8,00	0,00743	0,00069	8,00	-0,00073	-0,00007
9,00	0,00333	0,00005	9,00	-0,00032	-0,000005

Tab. 7.2 – Valores comparativos entre as soluções obtidas pelo código Timora e SPV (4x4) para os componentes grande e pequeno.

Nas figuras 7.3-a e 7.3-b, temos representados os componentes, grande e pequeno, em uma base com 6 elementos. Como podemos observar, o comportamento tanto do componente grande quanto do componente pequeno, são muito bem reproduzidos. Praticamente não há variações nos picos. Ocorrem apenas pequenas alterações para a região além de $r = 5,0 fm$. Isto reproduz o valor esperado para a energia de partícula independente em boa concordância com o valor obtido através da solução exata (Timora), o que pode ser observado na tabela 4.

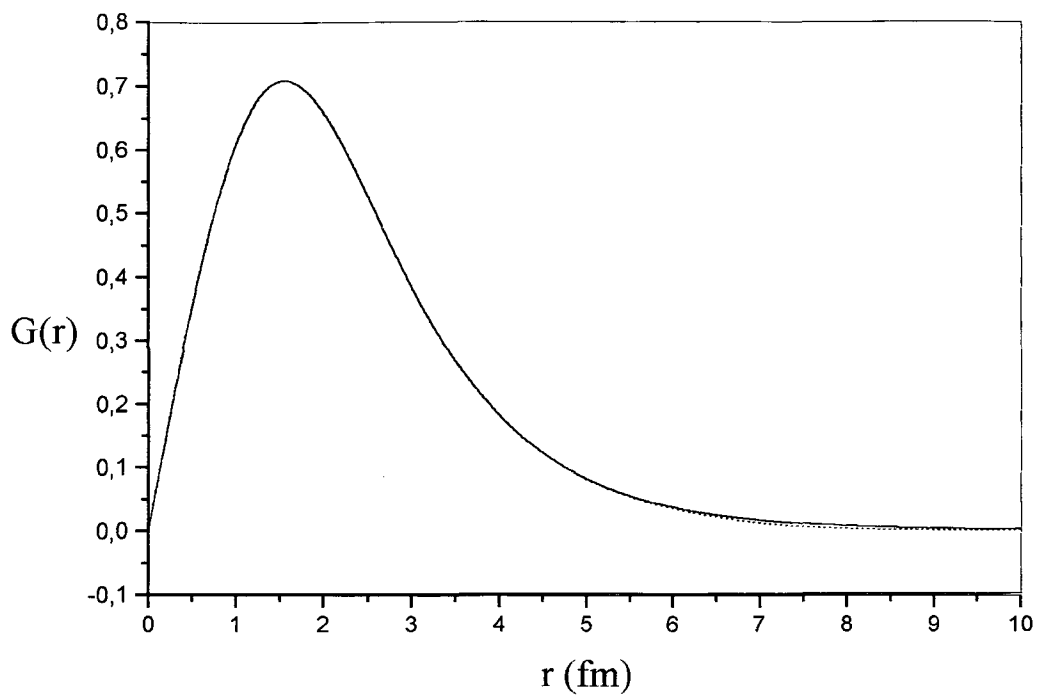


Fig. 7.3-a – Gráfico comparativo entre o componente grande obtido pelo Timora e SPV (6x6).

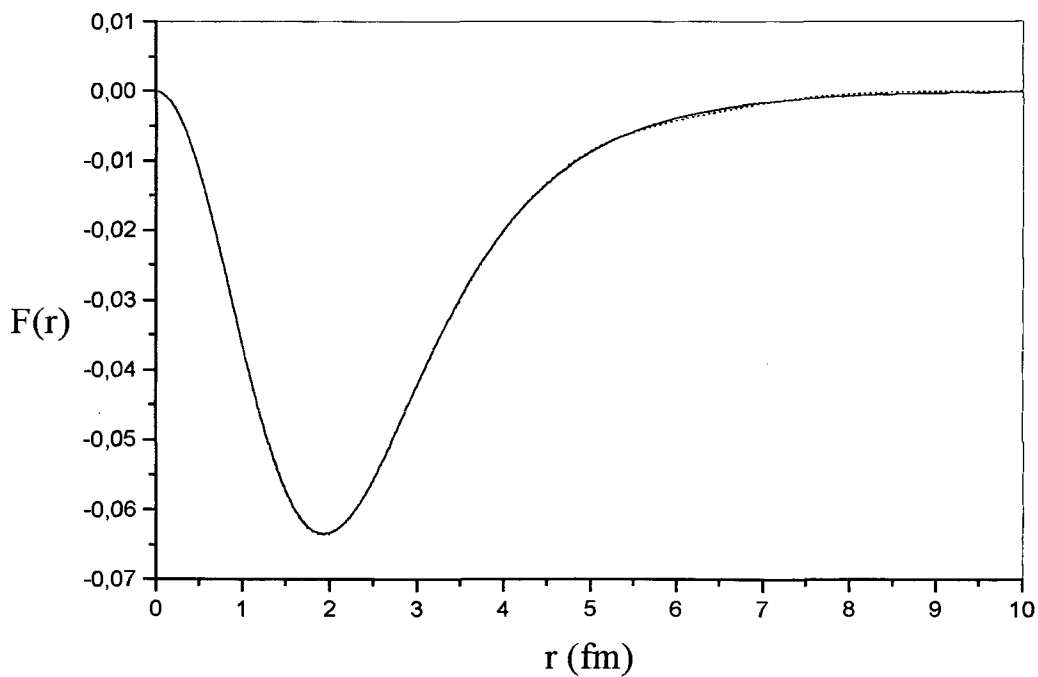


Fig. 7.3-b – Gráfico comparativo entre o componente pequeno obtido pelo Timora e SPV (6x6).

Na tabela 7.3 estão mostrados alguns pontos que mostram quantitativamente o bom comportamento para os componentes grande e pequeno. Este bom comportamento nos fornece um excelente resultado para a energia de partícula independente, listado na tabela 4. Podemos constatar que a região do pico está em excelente concordância com a solução exata, tanto para o componente grande, quanto para o componente pequeno. As pequenas variações que se apresentam para a região além de $r = 5,0 fm$ pouco influenciam os resultados.

G (r) Componente Grande			F (r) Componente Pequena		
r (fm)	Timora	SPV (6x6)	r (fm)	Timora	SPV (6x6)
1,50	0,70779	0,70690	1,90	0,06342	0,06355
1,55	0,70861	0,70780	1,95	0,06343	0,06355
1,60	0,70794	0,70730	2,00	0,06330	0,06340
5,00	0,08248	0,08169	5,00	0,00873	0,00860
6,00	0,03701	0,03501	6,00	0,00380	0,00416
6,50	0,02478	0,02159	6,50	0,00251	0,00286
7,00	0,01659	0,01217	7,00	0,00166	0,00179
7,50	0,01110	0,00609	7,50	-0,00110	-0,00098
8,00	0,00743	0,00267	8,00	-0,00073	-0,00046

Tab. 7.3 – Valores comparativos entre as soluções obtidas pelo código Timora e SPV (6x6) para os componentes grande e pequeno.

Método Aplicado	E _{1s} (MeV)	E _{gs} (MeV)	Overlap $\langle \Psi_{SPV} \Psi_{Timora} \rangle$
SPV – (1x1)	-14,793841	-4,632589	0,994663
SPV – (2x2)	-14,382087	-4,326053	0,995170
SPV – (3x3)	-13,841051	-4,815366	0,999060
SPV – (4x4)	-13,593691	-4,895044	0,999815
SPV- (5x5)	-13,497845	-4,874433	0,999874
SPV – (6x6)	-13,490583	-4,909367	0,999967
Código Timora	-13,457000	-4,892000	---

Tab. 7.4 – Valores para a energia de partícula independente para o estado $1s_{1/2}$ e Overlap entre a função de onda obtida pelo SPV e a função de onda obtida pelo código Timora .

Através da tabela 7.4 podemos observar que o valor para a energia se torna razoavelmente bom a partir de uma base (4x4), e um excelente resultado já é obtido com uma base (6x6). É interessante observar que apenas com uma base (1x1) o comportamento qualitativo da função de onda já é bem reproduzido, conforme ilustrado pelas figuras 7.1-a e 7.1-b. Isto pode ser entendido se observarmos o comportamento dos coeficientes da expansão das funções da base através da tabela 7.4. Podemos também constatar que o componente grande realmente predomina devido a magnitude do coeficiente do primeiro termo da expansão, em qualquer ordem..

Ordem da Expansão	x_n	y_n
1	-0,995841	0,091107
1	-0,995814	0,090859
2	-0,008154	-0,005677
1	-0,993408	0,088233
2	-0,045467	-0,007530
3	-0,055580	0,011904
1	-0,991761	0,086945
2	-0,085170	-0,007079
3	-0,068602	0,010343
4	-0,024554	0,000667
1	-0,991440	0,086632
2	-0,061645	-0,006774
3	-0,069510	0,010161
4	-0,027324	0,000576
5	-0,003106	0,002326
1	-0,991167	0,086540
2	-0,062420	-0,006821
3	-0,071081	0,010040
4	-0,029821	0,000350
5	-0,007679	0,001931
6	-0,006946	0,000489

Tab. 7.5 - Valores dos coeficientes da expansão; x_n , para o componente grande, e y_n , para o componente pequeno.

Conclusões

Pode-se constatar que a aplicação do método SPV fornece bons resultados, embora a convergência tenha exigido uma base relativamente grande. A sutileza da convergência pode ser uma característica inerente ao conjunto de funções escolhidas para compor a base e isto talvez seja contornável escolhendo outro conjunto de funções ortogonais para compor a base. De qualquer forma, uma parametrização mais rigorosa da função de onda nos possibilitaria reproduzir bons resultados com uma base (1x1), o que é excelente do ponto de vista numérico para cálculo de observáveis.

Uma das vantagens do método SPV é a possibilidade de se efetuar muitos dos cálculos analiticamente, exceto o do cálculo para o potencial o que também pode ser amenizado pela escolha de uma base formada por um conjunto de funções mais convenientes. Por exemplo o uso de uma base de exponenciais (SLATER), nos permitiria o cálculo analítico do potencial, tornando a parte numérica muito mais simples, pois evitaria o cálculo numérico de integrais, o que consome considerável tempo computacional.(a rotina leva cerca de 10s para um hamiltoniano 12x12)

Outra vantagem do procedimento variacional é o fato de podermos fixar o valor do parâmetro “ a ”. Isto acelera a convergência do cálculo da energia, nos permitindo uma boa aproximação com poucos estado de base. (conforme tabela 7.4 uma base formada com apenas uma componente já fornece um resultado razoável).

Apêndice 1

Oscilador Harmônico Tridimensional

A função de onda de partícula independente pode ser escrita como um produto das soluções, radial e angular, uma vez que a simetria do potencial (central) é esférica [11]. Assim, teremos:

$$\varphi(\vec{r}) = R(r)Y(\theta, \varphi).$$

A estrutura da equação diferencial nos sugere tomar a função radial na forma $R(r) = \frac{u(r)}{r}$ com o intuito de simplificar a obtenção da solução. Então, a equação que descreve o movimento radial será dada por:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dr^2} u(r) + \left[\frac{\ell(\ell+1)\hbar^2}{2mr^2} + V(r) \right] u(r) = Eu(r), \quad [\text{A1.01}]$$

onde $V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$.

Para a descrição de sistemas com estados ligados ($E < 0$), algumas condições para a função radial devem ser levadas em conta, tais como:

$$u(r) \rightarrow 0, \quad r \rightarrow \infty,$$

$$u(0) = 0.$$

A escolha feita para $R(r)$ nos leva a seguinte condição de normalização:

$$\int_0^{\infty} r^2 dr |R(r)|^2 = \int_0^{\infty} u^2(r) dr = 1. \quad [\text{A1.02}]$$

Tomando a forma para o potencial do oscilador harmônico na equação [A1.01], obtemos a equação radial de Laguerre, cuja solução é dada por:

$$u_{n,\ell}(r) = A_{n,\ell} r^{\ell+1} e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{\ell+1/2}(a^2 r^2), \quad [\text{A1.03}]$$

onde $A_{n,\ell}$ é um fator de normalização, $a = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$ é o inverso do comprimento do oscilador harmônico e $L_n^{\ell+1/2}(a^2 r^2)$ são os Polinômios Generalizados de Laguerre. Segundo ref.[1], os polinômios generalizados de Laguerre podem ser escritos explicitamente na forma

$$L_n^{\ell+1/2}(a^2 r^2) = \sum_{i=0}^n k_i^{\ell} (-1)^i (a^2 r^2)^i, \quad [\text{A1.04}]$$

com

$$k_i^{\ell} = \frac{\Gamma(n + \ell + 3/2)}{i!} \binom{n + \ell + 1/2}{n - i}. \quad [\text{A1.05}]$$

A condição de ortogonalidade pode ser facilmente obtida [1]. Assim:

$$\int_0^{\infty} z^x e^{-z} L_n^x(z) L_{n'}^x(z) dz = \delta_{n,n'} \frac{\Gamma(n+x+1)^3}{n!}. \quad [\text{A1.06}]$$

Os auto-valores de energia para as correspondentes auto funções [A1.03] são dados por:

$$E_n = \hbar\omega \left(2n + \ell + \frac{3}{2}\right).$$

As expressões [A1.03], [A1.04], [A1.05] e [A1.06] são usadas no capítulo 5.

Apêndice 2

Detalhes dos Cálculos Matemáticos

Seção 1 – Obtenção da equação matricial [5.04] do capítulo 5.

Definindo a notação $\varphi_m|\uparrow\rangle \equiv |\varphi_m, \uparrow\rangle$ com $m=1\dots M$ e $\chi_n|\downarrow\rangle \equiv |\chi_n, \downarrow\rangle$ com $n=1\dots N$, o elemento de matriz de [5.03] é então

$$\begin{pmatrix} \langle \varphi_0, \uparrow | H | \varphi_0, \uparrow \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \uparrow | H | \varphi_M, \uparrow \rangle & \langle \varphi_0, \uparrow | H | \chi_0, \downarrow \rangle & \cdots & \langle \varphi_0, \uparrow | H | \chi_N, \downarrow \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_M, \uparrow | H | \varphi_0, \uparrow \rangle & \cdots & \langle \varphi_M, \uparrow | H | \varphi_M, \uparrow \rangle & \langle \varphi_M, \uparrow | H | \chi_0, \downarrow \rangle & \cdots & \langle \varphi_M, \uparrow | H | \chi_N, \downarrow \rangle \\ \langle \chi_0, \downarrow | H | \varphi_0, \uparrow \rangle & \cdots & \langle \chi_0, \downarrow | H | \varphi_M, \uparrow \rangle & \langle \chi_0, \downarrow | H | \chi_0, \downarrow \rangle & \cdots & \langle \chi_0, \downarrow | H | \chi_N, \downarrow \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \chi_N, \downarrow | H | \varphi_0, \uparrow \rangle & \cdots & \langle \chi_N, \downarrow | H | \varphi_M, \uparrow \rangle & \langle \chi_N, \downarrow | H | \chi_0, \downarrow \rangle & \cdots & \langle \chi_N, \downarrow | H | \chi_N, \downarrow \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_0 \\ \vdots \\ x_M \\ y_0 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} x_0 \\ \vdots \\ x_M \\ y_0 \\ \vdots \\ y_N \end{pmatrix}$$

Lembrando que o operador hamiltoniano em [5.20] tem a forma

$$H = -i\sigma_2 \frac{d}{dr} - \frac{\sigma_1}{r} + \sigma_3(M + V_S) + 1V_V.$$

Como

$$\begin{array}{cccc} \langle \uparrow | \sigma_1 | \downarrow \rangle = 1 & \langle \downarrow | \sigma_1 | \uparrow \rangle = 1 & \langle \downarrow | \sigma_1 | \downarrow \rangle = 0 & \langle \uparrow | \sigma_1 | \uparrow \rangle = 0 \\ \langle \uparrow | \sigma_2 | \uparrow \rangle = 0 & \langle \uparrow | \sigma_2 | \downarrow \rangle = -i & \langle \downarrow | \sigma_2 | \uparrow \rangle = i & \langle \downarrow | \sigma_2 | \downarrow \rangle = 0 \\ \langle \downarrow | \sigma_3 | \uparrow \rangle = 0 & \langle \downarrow | \sigma_3 | \downarrow \rangle = -1 & \langle \uparrow | \sigma_3 | \downarrow \rangle = 0 & \langle \uparrow | \sigma_3 | \uparrow \rangle = 1 \end{array}$$

obtemos então a equação matricial,

$$\begin{pmatrix} M + V_S + V_V & W \\ W^T & -(M + V_S - V_V) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} = \mathcal{E} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix},$$

onde M é a massa do nucleon, V_S é o potencial escalar definido por [4.11], V_V é o potencial vetorial definido por [4.17] e W é o termo cinético, cuja forma é claramente observada em [5.05].

Seção 2 – Cálculo das constantes A_m e B_n dadas em [5.07] e dos elementos de matriz [5.05]

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{m,n},$$

$$\int_0^{\infty} dr A_m r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{1/2}(a^2 r^2) A_n r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{1/2}(a^2 r^2) = \delta_{m,n},$$

$$A_m A_n \int_0^{\infty} r^2 e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{1/2}(a^2 r^2) dr = \delta_{m,n}.$$

Aqui fazemos a mudança de variáveis

$$y = a^2 r^2, \quad r = \frac{y^{1/2}}{a}, \quad dr = \frac{1}{2} \frac{1}{y^{1/2} a} dy,$$

$$A_m A_n \frac{1}{2} \frac{1}{a^3} \int_0^{\infty} y^{1/2} e^{-y} L_m^{1/2}(y) L_n^{1/2}(y) dr = \delta_{m,n}.$$

Podemos verificar que a integral a ser resolvida é simplesmente a condição de ortogonalidade para os polinômios de Laguerre. De acordo com [A1.06], temos:

$$A_m A_n \frac{1}{2a^3} \delta_{m,n} \frac{\Gamma(m + 3/2)^3}{m!} = \delta_{m,n},$$

$$A_m = \sqrt{\frac{2a^3 m!}{\Gamma(m + 3/2)^3}}.$$

De maneira semelhante teremos:

$$\langle \chi_m | \chi_n \rangle = \delta_{m,n},$$

$$\int_0^{\infty} dr B_m r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{3/2}(a^2 r^2) B_n r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{3/2}(a^2 r^2) = \delta_{m,n},$$

$$B_m B_n \int_0^{\infty} r^4 e^{-a^2 r^2} L_m^{3/2}(a^2 r^2) L_n^{3/2}(a^2 r^2) dr = \delta_{m,n}.$$

Fazendo uma mudança de variáveis semelhante obtemos:

$$B_m B_n \frac{1}{2} \frac{1}{a^5} \int_0^\infty y^{3/2} e^{-y} L_m^{3/2}(y) L_n^{3/2}(y) dy = \delta_{m,n}.$$

e então, de acordo com [A1.06]:

$$B_m B_n \frac{1}{2a^5} \delta_{m,n} \frac{\Gamma(m + 5/2)^3}{m!} = \delta_{m,n},$$

$$B_m = \sqrt{\frac{2a^5 m!}{\Gamma(m + 5/2)^3}}.$$

→ Cálculo do elemento $\langle \varphi_m | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle$:

$$= \int_0^\infty dr A_m r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{1/2}(a^2 r^2) \frac{1}{r} B_n r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{3/2}(a^2 r^2),$$

onde os polinômios são dados explicitamente por [A2.01]. Então:

$$= A_m B_n \int_0^\infty r^2 e^{-a^2 r^2} \sum_{i=0}^m k_i^0 (-1)^i (a^2 r^2)^i \sum_{j=0}^n k_j^1 (-1)^j (a^2 r^2)^j dr.$$

Aqui lembramos que k_i^ℓ é dado por [A2.02]. Na integral acima vamos também definir. Então:

$$= A_m B_n \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} a^{2i+2j} \int_0^\infty r^{2+2i+2j} e^{-a^2 r^2} dr,$$

$$= A_m B_n \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} a^{2i+2j} \frac{\Gamma\left(\frac{2+2i+2j+1}{2}\right)}{2a^{2\left(\frac{2+2i+2j+1}{2}\right)}}.$$

Assim:

$$\langle \varphi_m | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle = \frac{A_m B_n}{2a^3} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^m k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right),$$

→ Cálculo de $\langle \chi_m | \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle$:

Podemos facilmente observar que o cálculo de $\langle \chi_m | \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle$ é praticamente análogo a $\langle \varphi_m | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle$.

Assim:

$$\langle \chi_m | \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle = \int_0^{\infty} dr B_m r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{3/2}(a^2 r^2) \frac{1}{r} A_n r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{1/2}(a^2 r^2),$$

onde, levando em conta os mesmos passos anteriores para obtenção de $\langle \varphi_m | \frac{1}{r} | \chi_n \rangle$, obteremos:

$$\langle \chi_m | \frac{1}{r} | \varphi_n \rangle = \frac{B_m A_n}{2a^3} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^1 k_j^0 (-1)^{i+j} \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right).$$

→ Cálculo do termo $\langle \varphi_m | \frac{d}{dr} | \chi_n \rangle$:

$$= \int_0^{\infty} dr A_m r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{1/2}(a^2 r^2) \frac{d}{dr} \left[B_n r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{3/2}(a^2 r^2) \right].$$

Na integral acima, a derivada do produto nos dá:

$$= A_m B_n \int_0^{\infty} dr r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{1/2}(a^2 r^2) \left[2r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{3/2}(a^2 r^2) + \right. \\ \left. - r^3 a^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{3/2}(a^2 r^2) + r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} \frac{d}{dr} L_n^{3/2}(a^2 r^2) \right].$$

Agora, escrevemos a integral acima com a soma das integrais.

$$\begin{aligned}
&= A_m B_n \left\{ 2 \int_0^{\infty} r^2 e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{3/2}(a^2 r^2) dr + \right. \\
&\quad - a^2 \int_0^{\infty} r^4 e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{3/2}(a^2 r^2) dr + \\
&\quad \left. + \int_0^{\infty} r^3 e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) \frac{d}{dr} L_n^{3/2}(a^2 r^2) dr \right\}.
\end{aligned}$$

Para resolvermos as integrais basta utilizarmos forma explicita para os polinômios de Laguerre, dadas por [A1.04].

$$\begin{aligned}
&= A_m B_n \left\{ 2 \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} \frac{(a^2)^{i+j}}{2(a^2)^{3/2+i+j}} \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right) + \right. \\
&\quad - \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} \frac{(a^2)^{i+j}}{2(a^2)^{5/2+i+j}} \Gamma\left(\frac{5}{2} + i + j\right) + \\
&\quad \left. + 2 \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} j \frac{(a^2)^{i+j}}{2(a^2)^{3/2+i+j}} \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right) \right\},
\end{aligned}$$

onde utilizando a propriedade das funções Gamma $\rightarrow \Gamma(n+1) = n\Gamma(n)$, obtemos:

$$\langle \varphi_m | \frac{d}{dr} | \chi_n \rangle = \frac{A_m B_n}{2(a^2)^{3/2}} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^0 k_j^1 (-1)^{i+j} (j - i + \frac{1}{2}) \Gamma\left(\frac{3}{2} + i + j\right).$$

→ Cálculo de $\langle \chi_m | \frac{d}{dr} | \varphi_n \rangle$:

O cálculo para estes elementos de matriz são muito semelhantes aos cálculos feitos para obtenção de $\langle \varphi_m | \frac{d}{dr} | \chi_n \rangle$, ou seja:

$$= \int_0^{\infty} dr B_m r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{3/2}(a^2 r^2) \frac{d}{dr} \left[A_n r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{1/2}(a^2 r^2) \right].$$

Refazendo os mesmos passos para o cálculo de $\langle \varphi_m | \frac{d}{dr} | \chi_n \rangle$, obteremos:

$$\langle \chi_m | \frac{d}{dr} | \varphi_n \rangle = \frac{B_m A_n}{2(a^2)^{3/2}} \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n k_i^1 k_j^0 (-1)^{i+j} (j - i - 1/2) \Gamma(3/2 + i + j).$$

→ Cálculo do termo $\langle \varphi_m | V_S | \varphi_n \rangle$:

$$= \int_0^{\infty} dr A_m r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{1/2}(a^2 r^2) V_S(r) A_n r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{1/2}(a^2 r^2),$$

onde vamos utilizar a notação $V_S(r)$ para o termo de potencial escalar dado por [4.11]. Assim:

$$= \int_0^{\infty} dr A_m r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{1/2}(a^2 r^2) \left(-\frac{g_\sigma^2}{\pi} \right) \int \frac{d^3 x'}{4\pi} \left(\frac{G(r')^2}{r'^2} - \frac{F(r')^2}{r'^2} \right) \frac{e^{-m_\sigma \bar{r}}}{\bar{r}} A_n r e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{1/2}(a^2 r^2),$$

onde $\bar{r} = |\vec{x}' - \vec{x}|$, $r' = |\vec{x}'|$ e $r = |\vec{x}|$. Então:

$$= -A_m A_n \frac{g_\sigma^2}{\pi} \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{1/2}(a^2 r^2) \times \int \frac{d^3 x'}{4\pi} \left(\frac{G(r')^2}{r'^2} - \frac{F(r')^2}{r'^2} \right) \frac{e^{-m_\sigma \bar{r}}}{\bar{r}}.$$

Tomando as expressões para $G(r')$ e $F(r')$ temos:

$$\rightarrow \frac{G(r')^2}{r'^2} = \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^m x_{\alpha} x_{\beta} A_{\alpha} A_{\beta} e^{-a^2 r'^2} L_{\alpha}^{1/2}(a^2 r'^2) L_{\beta}^{1/2}(a^2 r'^2),$$

$$\rightarrow \frac{F(r')^2}{r'^2} = \sum_{\mu=0}^n \sum_{\nu=0}^n x_{\mu} x_{\nu} B_{\mu} B_{\nu} r'^2 e^{-a^2 r'^2} L_{\mu}^{3/2}(a^2 r'^2) L_{\nu}^{3/2}(a^2 r'^2),$$

onda vamos, daqui em diante, omitir os limites das somas. Assim:

$$\begin{aligned} &= -A_m A_n \frac{g_{\sigma}^2}{\pi} \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{1/2}(a^2 r^2) \times \\ &\times \int \frac{d^3 x'}{4\pi} \left(\sum_{\alpha, \beta} x_{\alpha} x_{\beta} A_{\alpha} A_{\beta} e^{-a^2 r'^2} L_{\alpha}^{1/2}(a^2 r'^2) L_{\beta}^{1/2}(a^2 r'^2) + \right. \\ &\left. - \sum_{\mu, \nu} y_{\mu} y_{\nu} B_{\mu} B_{\nu} r'^2 e^{-b^2 r'^2} L_{\mu}^{3/2}(a^2 r'^2) L_{\nu}^{3/2}(a^2 r'^2) \right) \frac{e^{-m_{\sigma} \bar{r}}}{\bar{r}}. \end{aligned}$$

Agora, vamos organizar as integrais, separando a soma das integrais.

$$\begin{aligned} &= -\frac{A_m A_n g_{\sigma}^2}{\pi} \left\{ \sum_{\alpha, \beta} x_{\alpha} x_{\beta} A_{\alpha} A_{\beta} \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{1/2}(a^2 r^2) \times \right. \\ &\quad \times \int \frac{d^3 x'}{4\pi} e^{-a^2 r'^2} L_{\alpha}^{1/2}(a^2 r'^2) L_{\beta}^{1/2}(a^2 r'^2) + \\ &\quad \left. - \sum_{\mu, \nu} y_{\mu} y_{\nu} B_{\mu} B_{\nu} \int_0^{\infty} r^2 dr e^{-a^2 r^2} L_m^{1/2}(a^2 r^2) L_n^{1/2}(a^2 r^2) \times \right. \\ &\quad \left. \times \int \frac{d^3 x'}{4\pi} e^{-a^2 r'^2} L_{\mu}^{3/2}(a^2 r'^2) L_{\nu}^{3/2}(a^2 r'^2) \right\} \frac{e^{-m_{\sigma} \bar{r}}}{\bar{r}}. \end{aligned}$$

Tomando os polinômios em suas formas explícitas teremos:

$$\begin{aligned}
&= -\frac{A_m A_n g_\sigma^2}{\pi} \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha,\beta} \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^0 k_j^0 k_{\alpha'}^0 k_{\beta'}^0 (-1)^{i+j+\alpha'+\beta'} (a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times \right. \\
&\quad \times \int_0^\infty \frac{d^3 x}{4\pi} (r^2)^{i+j} e^{-a^2 r^2} \int_0^\infty \frac{d^3 x'}{4\pi} (r'^2)^{\alpha'+\beta'} e^{-a^2 r'^2} \frac{e^{-m_\sigma \bar{r}}}{\bar{r}} + \\
&\quad - \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu,\nu} \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^0 k_j^0 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-1)^{i+j+\mu'+\nu'} (a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times \\
&\quad \times \int_0^\infty \frac{d^3 x}{4\pi} (r^2)^{i+j} e^{-a^2 r^2} \int_0^\infty \frac{d^3 x'}{4\pi} (r'^2)^{\mu'+\nu'} e^{-a^2 r'^2} \frac{e^{-m_\sigma \bar{r}}}{\bar{r}} \left. \right\}.
\end{aligned}$$

A solução detalhada para as integrais duplas é feita na seção 3. Lá temos definida uma função geradora

$$I_{s,t}^\eta \equiv \int \frac{d^3 x}{4\pi} \int \frac{d^3 x'}{4\pi} r^{2s} e^{-ar^2} r'^{2t} e^{-ar'^2} \times \frac{e^{-M_\eta \bar{r}}}{\bar{r}}, \quad [\text{A5.01}]$$

cujas soluções é descrita também neste apêndice. Então:

$$\begin{aligned}
&\langle \varphi_m | V_S | \varphi_n \rangle = -\frac{A_m A_n g_\sigma^2}{\pi} \times \\
&\times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^0 k_j^0 k_{\alpha'}^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{i+j,\alpha'+\beta'}^\sigma + \right. \\
&\quad \left. - \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^0 k_j^0 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{i+j,\mu'+\nu'}^\sigma \right\}
\end{aligned}$$

→ Cálculo do termo $\langle \varphi_m | V_V | \varphi_n \rangle$:

A estrutura matemática do termo direto do potencial vetor é a mesma do termo de potencial escalar, a menos de sinais e da constante de acoplamento. Portanto, verifica-se que o resultado é análogo, a menos dos sinais e da constante de acoplamento. Assim

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m | V_V | \varphi_n \rangle = & + \frac{A_m A_n \mathbf{g}_\omega^2}{\pi} \times \\ & \times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^{\alpha} \sum_{\beta'=0}^{\beta} k_i^0 k_j^0 k_{\alpha'}^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{i+j, \alpha'+\beta'}^\omega + \right. \\ & \left. + \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^{\mu} \sum_{\nu'=0}^{\nu} k_i^0 k_j^0 k_{\mu'}^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{i+j, \mu'+\nu'}^\omega \right\}. \end{aligned}$$

→ Cálculo do termo $\langle \chi_m | V_S | \chi_n \rangle$:

$$= \int_0^\infty dr B_m r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_m^{3/2}(a^2 r^2) V_S(r') B_n r^2 e^{-\frac{a^2 r^2}{2}} L_n^{3/2}(a^2 r^2),$$

onde vamos refazer todos os passos feitos anteriormente para o cálculo de $\langle \varphi_m | V_S | \varphi_n \rangle$. A única diferença relevante aparece quando chegamos em:

$$= -B_m B_n \frac{\mathbf{g}_\sigma^2}{\pi} \int_0^\infty r^2 dr e^{-a^2 r^2} L_m^{3/2}(a^2 r^2) L_n^{3/2}(a^2 r^2) \times \int \frac{dx'^3}{4\pi} \left(\frac{G(r')^2}{r'^2} - \frac{F(r')^2}{r'^2} \right) \frac{e^{-m_\sigma \bar{r}}}{\bar{r}}.$$

Usando novamente as expressões para $G(r')$ e $F(r')$, obteremos:

$$\begin{aligned}
&= -B_m B_n \frac{g_\sigma^2}{\pi} \int_0^\infty r^4 dr e^{-a^2 r^2} L_m^{3/2}(a^2 r^2) L_n^{3/2}(a^2 r^2) \times \\
&\times \int \frac{dx'^3}{4\pi} \left(\sum_{\alpha, \beta} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta e^{-a^2 r'^2} L_\alpha^{1/2}(a^2 r'^2) L_\beta^{1/2}(a^2 r'^2) + \right. \\
&\left. - \sum_{\mu, \nu} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu r'^2 e^{-a^2 r'^2} L_\mu^{3/2}(a^2 r'^2) L_\nu^{3/2}(a^2 r'^2) \right) \frac{e^{-m_\sigma \bar{r}}}{\bar{r}}.
\end{aligned}$$

Assim, obteremos:

$$\begin{aligned}
\langle \chi_m | V_S | \chi_n \rangle &= -\frac{B_m B_n g_\sigma^2}{\pi} \times \\
&\times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^\alpha \sum_{\beta'=0}^\beta k_i^1 k_j^1 k_\alpha^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{2+i+j, \alpha+\beta}^\sigma + \right. \\
&\left. - \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^\mu \sum_{\nu'=0}^\nu k_i^1 k_j^1 k_\mu^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{2+i+j, \mu'+\nu'}^\sigma \right\}.
\end{aligned}$$

→ Cálculo do termo $\langle \chi_m | V_V | \chi_n \rangle$:

Novamente, verifica-se que o resultado é análogo, a menos dos sinais e da constante de acoplamento.

$$\begin{aligned}
\langle \chi_m | V_V | \chi_n \rangle &= +\frac{B_m B_n g_\sigma^2}{\pi} \times \\
&\times \left\{ \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\alpha=0}^m \sum_{\beta=0}^n \sum_{\alpha'=0}^\alpha \sum_{\beta'=0}^\beta k_i^1 k_j^1 k_\alpha^0 k_{\beta'}^0 (-a^2)^{i+j+\alpha'+\beta'} x_\alpha x_\beta A_\alpha A_\beta \times I_{2+i+j, \alpha+\beta}^\sigma + \right. \\
&\left. + \sum_{i=0}^m \sum_{j=0}^n \sum_{\mu=0}^m \sum_{\nu=0}^n \sum_{\mu'=0}^\mu \sum_{\nu'=0}^\nu k_i^1 k_j^1 k_\mu^1 k_{\nu'}^1 (-a^2)^{i+j+\mu'+\nu'} y_\mu y_\nu B_\mu B_\nu \times I_{2+i+j, \mu'+\nu'}^\sigma \right\}.
\end{aligned}$$

Seção 3 – Solução para a integral que aparece nos elementos de matriz [5.05], calculados na seção 2.

$$I_{s,t}^{\eta} \equiv \int \frac{d^3 x_1}{4\pi} \int \frac{d^3 x_2}{4\pi} r_1^{2s} e^{-\beta^2 r_1^2} r_2^{2t} e^{-\beta^2 r_2^2} \frac{e^{-M_{\eta} r}}{r}. \quad [\text{A2.01}]$$

Aqui apresentamos os detalhes matemáticos para a solução da integral acima. Por mera conveniência redefinimos algumas variáveis. Vamos resolver a integral acima considerando que apenas valores pares para s e t aparecem em nossas expressões. Temos ainda $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, $\vec{r}_1 = (x_1, y_1, z_1)$ e $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$. Vamos começar fazendo a mudança de escala

$$\begin{aligned} \vec{u}_1 &= \beta \vec{r}_1, & d^3 x_1 &= \frac{d^3 u_1}{\beta^3}, & d^3 x_2 &= \frac{d^3 u_2}{\beta^3}. \end{aligned} \quad [\text{A2.02}]$$

Assim:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(4\pi)^2} \int \frac{d^3 u_1}{\beta^3} \int \frac{d^3 u_2}{\beta^3} \frac{1}{\beta^{2s}} u_1^{2s} e^{-u_1^2} \frac{1}{\beta^{2t}} u_2^{2t} e^{-u_2^2} \times \beta \frac{e^{-M_{\eta} |\vec{u}_1 - \vec{u}_2| / \beta^2}}{|\vec{u}_1 - \vec{u}_2|}. \quad [\text{A2.03}]$$

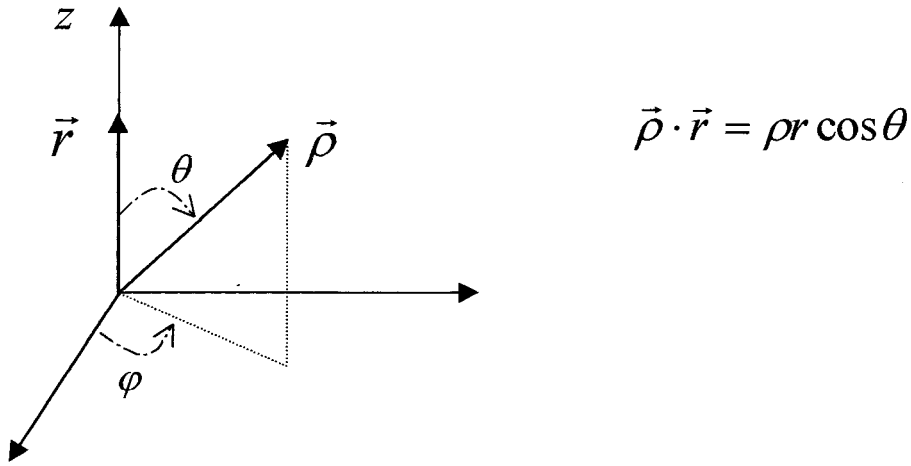
Vamos escolher:

$$\begin{aligned} \vec{\rho} &= \frac{1}{2} (\vec{u}_1 + \vec{u}_2), & \vec{u}_1 &= \vec{\rho} + \frac{\vec{r}}{2}, & \vec{u}_1^2 &= \rho^2 + \frac{r^2}{4} + \vec{\rho} \cdot \vec{r} \\ \vec{r} &= \vec{u}_1 - \vec{u}_2, & \vec{u}_2 &= \vec{\rho} - \frac{\vec{r}}{2}, & \vec{u}_2^2 &= \rho^2 + \frac{r^2}{4} - \vec{\rho} \cdot \vec{r} \end{aligned}$$

Então a integral [A2.03] pode ser escrita na forma:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{\beta^{5+2s+2t}} \int d\vec{r} \int d\vec{\rho} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} + \vec{\rho} \cdot \vec{r} \right)^s \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} - \vec{\rho} \cdot \vec{r} \right)^t e^{-(2\rho^2 + \frac{r^2}{2})} \frac{e^{-M_{\eta} r / \beta}}{r}.$$

Uma vez que \vec{r} e $\vec{\rho}$ são arbitrários podemos escolher orientações convenientes, assegurando apenas, que descrevam todo o volume. Uma possível escolha é:



Desta maneira obtemos:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{\beta^{5+2s+2t}} \int d\vec{r} \int d\vec{\rho} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} + \rho r \cos \theta \right)^s \times \\ \times \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} - \rho r \cos \theta \right)^t \times e^{-(2\rho^2 + \frac{r^2}{2})} \times \frac{e^{-M_{\eta} r / \beta}}{r}$$

Vamos escrever os termos $\rho^2 + \frac{r^2}{4} \pm \vec{\rho} \cdot \vec{r}$ na forma binomial, cuja forma geral é dada por:

$$(a + b)^k = \sum_{i=0}^k \binom{k}{i} a^{k-i} b^i$$

Assim:

$$\left[\left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right) + (\rho r \cos \theta) \right]^s = \sum_{i=0}^s \binom{s}{i} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right)^{s-i} (\rho r \cos \theta)^i,$$

$$\left[\left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right) + (-\rho r \cos \theta) \right]^t = \sum_{j=0}^t \binom{t}{j} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right)^{t-j} (-1)^j (\rho r \cos \theta)^j$$

Obtemos então:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{\beta^{5+2s+2t}} \sum_{i=0}^s \sum_{j=0}^t \binom{s}{i} \binom{t}{j} \int d\vec{r} \int d\vec{\rho} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right)^{s+t-i-j} \times$$

$$\times (-1)^j (\rho r \cos \theta)^{i+j} \times e^{-2\rho^2} \times e^{\frac{r^2}{2}} \times \frac{e^{-M_{\eta} r / \beta}}{r}$$

Assim:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{\beta^{5+2s+2t}} \sum_{i=0}^s \sum_{j=0}^t \binom{s}{i} \binom{t}{j} \int d\vec{r} e^{\frac{r^2}{2}} \times e^{-M_{\eta} r / \beta} \times r^{i+j-1} \times$$

$$\times \int d\vec{\rho} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right)^{s+t-i-j} (-1)^j (\rho \cos \theta)^{i+j} \times e^{-2\rho^2}$$

Primeiramente vamos resolver a integral em $d\vec{\rho}$, onde novamente vamos aplicar a forma binomial.

Assim, obtemos:

$$= (-1)^j \int_0^{\infty} \rho^2 d\rho \cdot \rho^{i+j} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right)^{s+t-i-j} e^{-2\rho^2} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \cos \theta^{i+j}$$

Vamos efetuar as integrais acima, as quais se tornaram triviais.

Obtemos:

$$\rightarrow \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi,$$

$$\rightarrow \int_0^{\pi} \sin \theta d\theta \cos \theta^{i+j} = - \int_{+1}^{-1} dx . x^{i+j} = \frac{x^{i+j+1}}{i+j+1} \Big|_{-1}^{+1} = \frac{1 - (-1)^{i+j+1}}{i+j+1},$$

$$\begin{aligned} \rightarrow \int_0^{\infty} \rho^2 d\rho . \rho^{i+j} \left(\rho^2 + \frac{r^2}{4} \right)^{s+t-i-j} e^{-2\rho^2} &= \\ &= \sum_{k=0}^{\ell} \binom{\ell}{k} \left(\frac{r}{2} \right)^{2\ell-2k} \int_0^{\infty} d\rho . \rho^{2+i+j+2k} e^{-2\rho^2} \\ &= \sum_{k=0}^{\ell} \binom{\ell}{k} \left(\frac{r}{2} \right)^{2\ell-2k} \frac{\Gamma\left(\frac{1+i+j}{2} + k + 1\right)}{2^{\frac{1+i+j}{2} + k + 2}}, \end{aligned}$$

onde fizemos $\ell = s+t-i-j$. A integral toma a forma:

$$\begin{aligned} I_{s,t}^{\eta} &= \frac{1}{(4\pi)^2} \frac{1}{\beta^{5+2s+2t}} \sum_{i=0}^s \sum_{j=0}^t \sum_{k=0}^{\ell} \binom{s}{i} \binom{t}{j} \binom{\ell}{k} (-1)^j \times \left(\frac{1 - (-1)^{i+j+1}}{i+j+1} \right) \times 2\pi \\ &\times \frac{\Gamma\left(\frac{1+i+j}{2} + k + 1\right)}{2^{\frac{1+i+j}{2} + k + 2}} \int d\vec{r} \left(\frac{r}{2} \right)^{2\ell-2k} e^{\frac{r^2}{2}} \times e^{-M_{\eta} r / \beta} \times r^{i+j-1} \end{aligned}$$

Agora vamos resolver a integral em $d\vec{r}$. Uma vez que o vetor \vec{r} é fixo na direção z , ele não apresenta componentes em relação as coordenadas ϕ e θ . Então:

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} \left(\frac{r}{2}\right)^{2\ell-2k} e^{\frac{r^2}{2}} \times e^{-M_\eta r/\beta} \times r^{i+j-1} &= \\ &= \int_0^\infty r^2 dr \left(\frac{r}{2}\right)^{2\ell-2k} r^{i+j-1} e^{\frac{r^2\beta-2M_\eta r}{2\beta}} \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \\ &= \frac{2\pi \times 2}{2^{2\ell-2k}} \times \int_0^\infty dr r^{1+i+j+2\ell-2k} e^{\frac{r^2\beta-2M_\eta r}{2\beta}} \end{aligned}$$

A solução para a integral em dr somente é viável numericamente. Contudo, podemos escrevê-la em uma forma mais adequada. Escolhendo $r = \sqrt{2}y'$ teremos:

$$= \frac{4\pi \times 2^{\frac{1}{2}(2+i+j+2\ell-2k)}}{2^{2\ell-2k}} \int_0^\infty dy' \cdot y'^{(1+i+j+2\ell-2k)} e^{y'^2} e^{M_\eta y' \frac{\sqrt{2}}{\beta}}$$

Agrupando os resultados para a integral em $d\vec{\rho}$ e para a integral em $d\vec{r}$ obtemos:

$$\begin{aligned} I_{s,t}^\eta &= \frac{8\pi^2}{(4\pi)^2} \frac{1}{\beta^{5+2s+2t}} \sum_{i=0}^s \sum_{j=0}^t \sum_{k=0}^\ell \binom{s}{i} \binom{t}{j} \binom{\ell}{k} (-1)^j \times \left(\frac{1 - (-1)^{i+j+1}}{i+j+1} \right) \times \\ &\times \frac{\Gamma\left(\frac{1+i+j}{2} + k + 1\right)}{2^{\frac{1+i+j}{2} + k + 2 + 2\ell - 2k}} 2^{\frac{1}{2}(2+i+j+2\ell-2k)} \int_0^\infty dy' \cdot y'^{(1+i+j+2\ell-2k)} e^{y'^2} e^{M_\eta y' \frac{\sqrt{2}}{\beta}} \end{aligned}$$

Agrupando os termos semelhantes e substituindo $\ell = s + t - i - j$, obtemos:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(\sqrt{2}\beta)^{5/2+s+t}} \sum_{i=0}^s \sum_{j=0}^t \sum_{k=0}^{s+t-i-j} \binom{s}{i} \binom{t}{j} \binom{s+t-i-j}{k} \left(\frac{1-(-1)^{i+j+1}}{i+j+1} \right) \times$$

$$\times \Gamma\left(\frac{1+i+j}{2} + k + 1\right) \times \int_0^{\infty} dy' y'^{(1+i+j+2\ell-2k)} e^{y'^2} e^{M_{\eta} y' \frac{\sqrt{2}}{\beta}},$$

onde a integral em dy' é resolvida numericamente. Assim:

$$I_{s,t}^{\eta} = \frac{1}{(\sqrt{2}\beta)^{5/2+s+t}} \sum_{i=0}^s \sum_{j=0}^t \sum_{k=0}^{s+t-i-j} \binom{s}{i} \binom{t}{j} \binom{s+t-i-j}{k} \times$$

$$\times \left(\frac{1-(-1)^{i+j+1}}{i+j+1} \right) \times \Gamma\left(\frac{1+i+j}{2} + k + 1\right) \times I(1+i+j+2\ell-2k),$$

onde usamos

$$I(\delta) = \int_0^{\infty} dy' y'^{(\delta)} e^{y'^2} e^{M_{\eta} y' \frac{\sqrt{2}}{\beta}}$$

A expressão $I_{s,t}^{\eta}$ é usada para calcular os elementos de matriz que dependem do termo de potencial escalar e do termo direto do potencial vetor.

Apêndice 3

Equação de Dirac

A descrição quântico relativística para uma partícula deve satisfazer várias condições: primeiro, nós precisamos estar aptos a definir uma densidade de probabilidade real e positiva, $Q(\vec{x}, t)$, a qual a integral de volume $\int Q(\vec{x}, t) d^3x = 1$ é um Escalar de Lorentz; segundo, a probabilidade total de encontrar uma partícula em algum lugar do espaço tem que ser uma constante, ou seja, $\left(\frac{d}{dt}\right) \int Q(\vec{x}, t) d^3x = 0$. Isto será automaticamente satisfeito se existir um quadri-vetor *densidade de corrente*, $j^\mu = (Q, \vec{j})$, que seja uma quantidade conservada, para o qual

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} j^\mu \equiv \partial_\mu j^\mu = \frac{\partial}{\partial t} j^0 + \nabla \cdot \vec{j} = 0.$$

Finalmente, o princípio da correspondência demanda que partículas livres, de massa M , obedeçam a relação $E^2 = p^2 + M^2$, entre energia E e momento p . Para termos uma densidade de probabilidade positiva definida, temos de requerer uma equação de primeira ordem no tempo e isto implica em uma equação dinâmica na forma

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{x}, t) = H \Psi(\vec{x}, t),$$

onde $\Psi(\vec{x}, t)$ é a função de onda e H é o operador hamiltoniano. Contudo, ao utilizarmos a correspondência usual $E \rightarrow H \rightarrow i \frac{\partial}{\partial t}$ e $\vec{p} \rightarrow i \nabla$, somos levados a relações entre segundas derivadas. Isto é similar a situação em eletrodinâmica clássica, onde as equações de campo que acoplam \vec{E} e \vec{B} são de primeira ordem nas derivadas de espaço e tempo, ainda que cada componente do campo eletromagnético livre satisfaça uma equação de onda em segunda ordem. Procedendo em analogia, nós expressamos a função de onda relativística como um campo multicomponente $\Psi_n(\vec{x}, t)$, com $n = 1, 2, 3, \dots, N$, os quais suas componentes são acopladas por

uma equação dinâmica que é linear nas componentes Ψ_n e contém somente primeiras derivadas. A forma geral para esta equação é

$$-i \frac{\partial}{\partial t} \Psi_m(\vec{x}, t) = -i \alpha_{mn} \cdot \nabla \Psi_n(\vec{x}, t) + M \beta_{mn} \Psi_n(\vec{x}, t), \quad [\text{A3.01}]$$

Aqui os coeficientes $(\alpha_{mn}^1, \alpha_{mn}^2, \alpha_{mn}^3)$ e β_{mn} são matrizes $N \times N$.

Para determinarmos os coeficientes das matrizes, nós vamos impor as condições que seguem: definimos a densidade de probabilidade positiva e real, $Q = \Psi_n^* \Psi_n = \Psi^\dagger \Psi$, onde introduzimos a notação

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_1 \\ \vdots \\ \Psi_n \end{pmatrix} \text{ e } \Psi^\dagger = (\Psi_1, \dots, \Psi_n),$$

e então, ao impormos $(\partial/\partial t) \Psi^\dagger \Psi = 0$ e usando [A3.01] teremos:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger \Psi = -i \nabla \cdot (\Psi^\dagger \alpha \Psi) + i (\nabla \Psi^\dagger) \cdot (\alpha - \alpha^\dagger) \Psi + M \Psi^\dagger (\beta - \beta^\dagger) \Psi.$$

Para garantir a hermiticidade do hamiltoniano precisamos impor $\alpha^\dagger = \alpha$ e $\beta^\dagger = \beta$. Assim:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger \Psi = -i \nabla \cdot (\Psi^\dagger \alpha \Psi). \quad [\text{A3.02}]$$

Definindo o vetor densidade de corrente como $\vec{j} = \Psi^\dagger \alpha \Psi$, e substituindo em [A3.02] resgatamos a equação da continuidade, ou seja,

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi^\dagger \Psi + i \nabla \cdot (\Psi^\dagger \alpha \Psi) = 0 \rightarrow \frac{\partial}{\partial t} Q + \nabla \cdot \vec{j} = 0.$$

Considerando a relação relativística entre energia e momento, usando $E \rightarrow i \partial/\partial t$ e $\vec{p} = -i \nabla$, atuando em um estado Ψ teremos:

$$E^2 = p^2 + M^2 \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = (-\nabla^2 + M^2) \Psi. \quad [\text{A3.03}]$$

Agora, usando [A3.01] obtemos:

$$-\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Psi = -\frac{1}{2}(\alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i) \nabla^i \nabla^j \Psi - iM(\beta \alpha^i + \alpha^i \beta) \nabla^i \Psi + M^2 \beta^2 \Psi.$$

A equação acima nós levará à [A3.03] se:

$$\begin{aligned} \alpha^i \alpha^j + \alpha^j \alpha^i &= \{\alpha^i, \alpha^j\} = -2\delta^{ij} \\ \beta \alpha^i + \alpha^i \beta &= \{\beta, \alpha^i\} = 0 \\ (\alpha^i)^2 &= \beta^2 = 1 \end{aligned} \quad [A3.04]$$

Estas relações juntamente com as relações, $\alpha^\dagger = \alpha$ e $\beta^\dagger = \beta$, definidas anteriormente, implicam que α^i e β sejam matrizes com dimensão mínima para $N = 4$, e esta escolha foi tomada originalmente por Dirac. Uma notação usualmente utilizada para as matrizes α^i e β é definida por:

$$\alpha^i \equiv \begin{pmatrix} 0 & \sigma^i \\ \sigma^i & 0 \end{pmatrix} \text{ e } \beta \equiv \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix},$$

onde utilizado a notação: $0 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$, $I \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ e σ^i são as matrizes de Pauli (2x2).

Agora nós podemos introduzir uma notação covariante através da definição de quatro matrizes γ^μ , $\mu = 0, 1, 2, 3$, tais que: $\gamma^0 = \beta$ e $\vec{\gamma} = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3) = \beta \alpha^i$. Com esta notação, a equação [A3.01] pode ser escrita em uma forma compacta dada por:

$$(i\gamma_\mu \partial^\mu - M)\Psi = 0,$$

onde $\gamma^\mu = g^{\mu\nu} \gamma_\nu = (\gamma_0, \vec{\gamma})$. Aqui $g^{\mu\nu}$ é a métrica definida por

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

e as relações de anti-comutação, [A3.04], serão agora dadas por:

$$\gamma^\mu \gamma^\nu + \gamma^\nu \gamma^\mu = \{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}.$$

Referências

- [1] R. Brockmann, Phys. Rev. C. 18(1978)1510.
- [2] Hehl, Maximilian E. – Linguagem de Programação Estruturada FORTRAN 77, São Paulo, McGraw-Hill c1964.
- [3] De Vries, Paul L. – A First Course in Computacional Physics, New York, J.Wiley c1994.
- [4] Dicke, R. H. and Wittke, J. P. – Introduction to Quantum Mechanics, Addison-Wesley, 1960.
- [5] J.D. Talman, Phys. Rev. Lett. 57(1986)1091.
- [6] J. Giammarco and J. Franklin, Phys. Rev. A 36(1987)5839.
- [7] A. Kolakowska, J.D. Talman and K. Aashamar, Phys. Rev. A 53(1996)168.
- [8] J. Franklin and R. Intemann, Phys. Rev. Lett. 54 (1985)2068.
- [9] Walecka, J. D, Serot, B. D. – Advances in Nuclear Physics volume 16; Negele, J.W. and Vogt, Erich, Penum Press, New York-London
- [10] Bjorken e Drell - Relativistic Quantum Mechanics, New York, McGraw-Hill c1964
- [11] J.K. Zhang and D.S. Onley, Nucl. Phys. A526(1991)245
- [12] Heyde, Kris L. G. – The Nuclear Shell Model, Spring Verlag, 1996.