

Energia de Separação em Camadas Internas de Núcleos

Ruth de Souza Schneider

Porto Alegre
1974

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE FÍSICA

ENERGIA DE SEPARAÇÃO EM CAMADAS INTERNAS DE NÚCLEOS*

Ruth de Souza Schneider

Dissertação realizada sob a orientação da Dra. Victoria E. Herscovitz e do Dr. Gerhard Jacob, apresentada ao Instituto de Física da UFRGS para obtenção do título de Mestre em Ciências.

* Trabalho parcialmente financiado pelas seguintes Instituições: Conselho Nacional de Pesquisas, Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Organização dos Estados Americanos.

Porto Alegre

1 9 7 4

UFRGS
Instituto de Física
Biblioteca

Agradeço ao Dr. Adalberto Vasquez pela elaboração do programa de ajustamento de mínimos quadrados. Agradeço a Dra. Victoria E. Herscovitz e ao Dr. Gerhard Jacob pela orientação recebida durante a realização deste trabalho.

I N D I C E

I - Introdução	I
II - Cálculo de energias de partícula única em núcleos	
II.1 - Método de Hartree-Fock	7
II.2 - Teoria de Brueckner	21
III - Cálculo da energia de separação de nucleons fortemente ligados	
III.1 - Energia de separação média	34
III.2 - Energia de separação para um potencial central	46
III.3 - Energia de separação para um potencial spin-órbita	57
IV - Aplicação a núcleos das camadas 1s, 1p e 2s-1d	64
V - Conclusões	82
Referências Bibliográficas	86
Apêndice A	
Apêndice B	
Apêndice C	
Apêndice D	
Apêndice E	

RESUMO

É apresentado um estudo relativo a energias de separação de nucleons nucleares. Os resultados de cálculos de energias de separação nos métodos de Hartree-Fock e de Brueckner-Hartree-Fock são comparados com os resultados experimentais. O trabalho de Brink e Sherman em que se calcula a contribuição à energia de separação devido a um potencial central, usando o modelo de partícula única e acoplamento $l-s$, é analisado. Adotando as mesmas hipóteses básicas destes autores, adaptadas para a situação de acoplamento $j-j$, é calculada a contribuição à energia de separação quando atua uma força soma de uma força central e uma força spin-órbita. As expressões obtidas são apresentadas como funções de parâmetros que dependem da interação nucleon-nucleon. Através de aplicações a estados de núcleos das camadas $1s$, $1p$ e $2s-1d$, são realizadas inúmeras tentativas de ajustamento dos valores dos parâmetros, usando o método dos mínimos quadrados, de modo a tentar reproduzir os valores experimentais das energias. Fica evidenciada nos resultados obtidos, uma grande instabilidade nos valores de quase todos os parâmetros, não sendo possível obter um conjunto único de parâmetros que reproduza satisfatoriamente os valores experimentais de energias de separação. Tal resultado indica que uma análise mais sofisticada do comportamento dos valores dos parâmetros deve ser feita, sendo esboçada uma linha de trabalho futuro.

I. INTRODUÇÃO

É básico, no estudo teórico do núcleo atômico, um conhecimento de todos os tipos de dados experimentais existentes, pois uma teoria nuclear, se existir, deverá conduzir a resultados compatíveis com estes. São conhecidas experimentalmente algumas das grandezas seguintes: 1) níveis de energia, spins, momentos magnéticos, momentos quadrupolares, probabilidades de transição (e consequentemente meias-vidas)¹⁾; 2) parâmetros de espalhamento a baixa energia, que permitem determinar o comprimento de espalhamento e o alcance efetivo do potencial, embora não univocamente (espalhamento de prótons e nêutrons por núcleos), o raio nuclear e a espessura da superfície nuclear (espalhamento de elétrons por núcleos)²⁾, assim como informações sobre a distribuição de carga e massa nos núcleos; 3) dados de espalhamento a alta energia ((p,2p) e (e,e'p), por exemplo)³⁾, que permitem determinar as energias de separação e a distribuição de momentum⁴⁾ dos estados-furo. Este conhecimento experimental não é completo.

O estudo do núcleo atômico através de modelos tem-se mostrado valioso para estimativas de níveis de energia, spins, momentos magnéticos, momentos quadrupolares e probabilidades de transição dos núcleos. Tais estimativas permitem afirmar que um determinado núcleo obedece preponderantemente ou ao modelo de camadas ou ao modelo coletivo ou a algum outro modelo que é, em geral, um refinamento de um daqueles dois. Estes modelos, entretanto, não levam em conta, em detalhe, o potencial nuclear. Por outro lado, nem as experiências de espalhamento a baixa energia, que fornecem propriedades globais do núcleo, nem as experiências a alta energia, que fornecem detalhes sobre a estrutura nuclear, permitem determinar a forma do potencial nuclear univocamente.

Examinemos o que se conhece, empiricamente, sobre as forças nucleares, baseando-nos no trabalho de Fetter e Walecka⁵⁾:

1) As forças nucleares são atrativas pois: a) existem núcleos atômicos ligados e estáveis; b) a existência do deuteron com spin 1 e paridade par implica em que no es-

tado triplete a interação próton-nêutron é atrativa; c) a força nuclear entre dois prótons no estado singlete também é atrativa, como mostra uma análise de interferência entre o espalhamento coulombiano e o espalhamento nuclear do sistema próton-próton.

2) As forças nucleares são de curto alcance (alguns fentômetros), o que pode ser estimado da seção de choque diferencial para espalhamento próton-nêutron para energias do nucleon incidente da ordem de 10 MeV.

3) As forças nucleares dependem de spin. Um potencial independente de spin que explicasse as propriedades do dêuteron não conseguiria dar origem a uma seção de choque próton-nêutron a baixa energia como a medida experimentalmente ($\sigma_{np}(0) = 20,4$ barns). Esta seção de choque pode ser obtida contudo, se fizermos uma média estatística das seções de choque singlete e triplete ($\sigma_{np} = \frac{3}{4}(3\sigma) + \frac{1}{4}(1\sigma)$) o que implica em que os potenciais para os estados singlete e triplete do dêuteron são diferentes. As experiências de espalhamento próton-nêutron a baixa energia fornecem os seguintes valores⁶⁾ para os parâmetros do potencial nuclear nos estados singlete e triplete respectivamente:

$$1_a = -23,71 \pm 0,07 \text{ fm.}$$

$$1_{r_0} = 2,4 \pm 0,3 \text{ fm.}$$

$$3_a = 5,38 \pm 0,03 \text{ fm.}$$

$$3_{r_0} = 1,71 \pm 0,03 \text{ fm.}$$

onde a é o comprimento de espalhamento e r_0 o alcance efetivo.

Embora se observe uma grande diferença nos comprimentos de espalhamento e nas seções de choque a energia nula, os potenciais singlete e triplete são bastante similares, ambos apresentando um estado ligado a energia quase nula.

4) As forças nucleares são não centrais, ou seja, o potencial nuclear não é invariante frente a rotações no espaço de coordenadas. Tal evidência provém do fato de o dêuteron apresentar momento de quadrupolo, o que implica em

que o seu estado fundamental é uma mistura de momentum angular $l = 2$ e $l = 0$.

5) As forças nucleares são independentes de carga, ou seja, quaisquer dois nucleons em um determinado estado sempre estão sujeitos à mesma força.

6) As forças nucleares são forças de troca, no sentido de que ao potencial nuclear devemos adicionar um termo do tipo

$$V = V(x) \frac{1}{2} (1 + P_M)$$

chamado de força de Serber, onde P_M é o operador de troca espacial de Majorana. Tal característica do potencial nuclear é necessária para explicar, por exemplo, o comportamento da secção de choque diferencial para espalhamento elástico neutron-proton a altas energias (até 600 MeV). Se supuséssemos que o potencial não apresenta a característica de troca, poderíamos escrever em primeira aproximação de Born:

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right)_{\text{cm}} \approx \left| \frac{m}{4\pi\hbar^2} \int e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}} V(\mathbf{x}) d^3x \right|^2$$

Havendo alta transferência de momentum ($\hbar q$ grande), a secção de choque deveria decrescer à medida que θ aumenta; entretanto, experimentalmente⁷⁾ isto não ocorre e, aparentemente, existe uma simetria tal que $f(\pi-\theta) = f(\theta)$ o que implica em que apenas os valores pares de l contribuem para a secção de choque. Tal fato pode ser explicado se introduzirmos uma força de Serber. A secção de choque obtida neste caso é simétrica em relação a 90° .

7) As forças nucleares tem um caroço repulsivo como foi sugerido por Jastrow⁸⁾ para explicar o comportamento da secção de choque diferencial p-p para energias no sistema laboratório de até 500 MeV⁷⁾. As secções de choque diferenciais p-p e n-p tem comportamentos distintos, e o fato de a parte nuclear da secção de choque diferencial p-p ser isotrópica, levou Jastrow a sugerir que fosse introduzido

um caroço repulsivo no potencial singlete, pois isto teria como consequência alterar o sinal do deslocamento de fase da onda S a altas energias. Desta forma o termo de interferência $l_D l_S$, no espalhamento p-p, poderia dar origem a uma distribuição quase uniforme, como se observa experimentalmente.

8) As forças nucleares devem conter um termo spin-órbita

$$V = - V_{SO} \underline{L} \cdot \underline{S}$$

já que forças somente centrais e tensoriais não podem explicar as polarizações muito grandes dos nucleons espalhados na direção perpendicular ao plano de espalhamento. Existe alguma evidência teórica de que a força spin-órbita de uma partícula, que é uma das hipóteses básicas no modelo de camadas (e que consegue explicar a existência dos números mágicos), provenha desta força spin-órbita entre nucleons⁹⁾.

Baseados nestes dados empíricos sobre as forças nucleares, foram propostos muitos potenciais fenomenológicos, entre os quais destacam-se o de Hamada-Johnston¹⁰⁾, o do grupo de Yale¹¹⁾ e o de Reid¹²⁾.

É interessante observar que se o potencial é suposto local, se não existe estado ligado e se os deslocamentos de fase de espalhamento são conhecidos para todas as energias, então o potencial é único. Em realidade, o potencial não é determinado de forma única e existe um grande número de potenciais locais que predizem os mesmos deslocamentos de fase. Se admitirmos potenciais não locais, existe uma infinidade de potenciais dependentes de velocidade possíveis. Todos estes potenciais locais e não locais podem reproduzir os mesmos dados de espalhamento de dois nucleons livres e a energia de ligação do deuteron, mas em geral predizem propriedades completamente diferentes para sistemas de muitos nucleons.

Podemos dizer, de modo geral que, ou tratamos do núcleo atômico modelisticamente, o que é útil para estimativas de níveis de energia, spins, momentos magnéticos, momentos quadrupolares e probabilidades de transição, ou

nos defrontamos com o problema de, escolhido um potencial nuclear empiricamente, testá-lo para verificar as propriedades nucleares, o que é trabalhoso e, em geral, não traz contribuições satisfatórias para o conhecimento do núcleo atômico.

Outra orientação adotada no estudo dos sistemas nucleares é a de realizar os chamados cálculos auto-consistentes de núcleos. Este tipo de cálculo tem por finalidade obter propriedades nucleares a partir do conhecimento da interação nucleon-nucleon livre.

Tem-se, neste caso, por objetivo calcular as seguintes grandezas que são medidas experimentalmente: 1) das propriedades da matéria nuclear, a energia de ligação por nucleon e a densidade (ou o momentum de Fermi $K_F = (\frac{3\pi^2 \rho}{2})^{1/3}$); 2) das propriedades dos núcleos finitos, a energia de ligação por nucleon, o raio nuclear, a espessura da superfície nuclear e a energia de separação de nucleons.

Vamos, neste trabalho, estudar uma destas propriedades: a energia de separação de nucleons. Cálculos de energia de separação podem ser usados, por exemplo, como um teste para o modelo de camadas ou, supondo a estrutura do núcleo regida pelo modelo de camadas, para a obtenção de dados sobre o potencial nuclear. Neste trabalho, os cálculos de energia de separação tem em vista a segunda alternativa: descrevemos a estrutura nuclear através do modelo de camadas, e supomos um potencial nuclear, inicialmente central e posteriormente com acoplamento spin-órbita, de modo que, através dos dados experimentais conhecidos de energias de separação, se obten parâmetros do potencial. Estes parâmetros como se verá no capítulo III, em realidade, para serem calculados, implicariam em um conhecimento da forma do potencial nuclear.

É conveniente observar que os dados experimentais obtidos das experiências de espalhamento ($p, 2p$) e ($e, e'p$) fornecem as energias dos estados furo¹³⁾, que não são necessariamente iguais às energias de separação das partículas que ocupavam tais estados. Entretanto, em um modelo de partícula única tais energias são iguais e, como adotaremos em nosso trabalho tal modelo para o núcleo, os dados de

energias de separação por nós utilizados serão os obtidos das experiências de espalhamento $(p,2p)$ e $(e,e'p)$.

No capítulo II analisamos os métodos de Hartree-Fock e de Brueckner de cálculos auto-consistentes comumente empregados para tratar problemas de muitos corpos, em particular o problema nuclear.

O capítulo III apresenta o cálculo da energia de separação de núcleons fortemente ligados usando potenciais central e spin-órbita.

No capítulo IV são realizadas aplicações a núcleos até a camada $2s-1d$ e no capítulo V discutidos os resultados obtidos.

II. CÁLCULOS DE ENERGIAS DE PARTÍCULA ÚNICA EM NÚCLEOS

Neste capítulo analisaremos os métodos de aproximação de Hartree-Fock e Brueckner-Hartree-Fock para resolver a equação de Schrödinger.

O método de Hartree-Fock é um modelo de partícula independente ao passo que as técnicas de Brueckner se referem a um modelo de par independente.

O primeiro substitui a ação de todas as partículas do núcleo sobre uma determinada partícula, por um potencial médio, enquanto o segundo trata a interação entre duas partículas do núcleo exatamente, e apenas substitui o efeito de todas as outras partículas, sobre o par em interação, por uma média.

Nas seções II.1 e II.2 abordaremos cada um destes métodos separadamente, tendo em vista mostrar como se obtém a energia de separação, de que grandezas esta depende e que tipos de resultados são obtidos em cada caso.

II.1 Método de Hartree-Fock

O objetivo dos cálculos de Hartree-Fock para núcleos é o mesmo que na física atômica: partindo de uma força de dois corpos nucleon-nucleon tenta-se construir de forma auto-consistente o campo do modelo de camadas. Deste ponto de vista, os cálculos de Hartree-Fock são apenas uma primeira etapa de um cálculo mais completo.

A hipótese básica do modelo de camadas é a de que os nucleons no núcleo comportam-se como partículas independentes, que se movem no campo criado pela presença dos outros nucleons. Em cálculos práticos do modelo de camadas, este campo médio é escolhido de forma bastante arbitrária, dependendo de parâmetros que são ajustados para cada núcleo de modo a reproduzir dados experimentais. Desta forma, o sucesso do modelo está intimamente relacionado aos parâmetros ajustáveis. Em uma teoria melhor, deve-se partir do Ha-

miltoniano nuclear para construir o potencial do modelo de camadas. Este é o procedimento usual em física atômica, onde o método de Hartree-Fock é usado para construir o campo médio. As interações reais entre nucleons contem um caroço infinito repulsivo, o que implica em que os elementos de matriz de tal interação entre partículas que se movem independentemente, são infinitos¹⁴⁾. Há poucos anos, uma modificação do método de Hartree-Fock foi desenvolvida para potenciais singulares. Também foram obtidas algumas interações reais com caroço não repulsivo.

A aproximação no método de Hartree-Fock se refere à função de onda que descreve o sistema de n-corpos em interação. Supõe-se, neste método, que tal função de onda é o produto antissimetrizado de funções de onda de partícula única. Estas funções de onda não são especificadas, a priori, mas escolhidas de modo a satisfazer certos critérios pré-estabelecidos. Estes critérios podem ser, por exemplo, a imposição de que a energia obtida seja mínima ou a imposição de que haja auto-consistência entre o potencial de partícula única para o qual as funções de onda de partícula única são calculadas e o potencial médio experimentado por uma partícula como resultado de sua interação com todas as outras.

Esta aproximação nos diz que, qualitativamente, podemos descrever o sistema de n-corpos como sendo constituído de partículas que se movem isoladamente em um certo potencial médio. Observa-se que o método de Hartree-Fock é muito apropriado para ser associado a estudo de modelo de camadas nucleares, já que usa uma aproximação que é intrínseca ao modelo de camadas.

Entretanto, esta aproximação impõe limites à validade do método pois, se estamos supondo que cada partícula do sistema de n corpos se move independentemente em um potencial médio, isto implica em que o potencial real experimentado pela partícula deve ser aproximadamente constante, de modo que o potencial médio seja uma boa aproximação da realidade. Estamos, então, impondo restrições nas interações possíveis entre os n-corpos que constituem o sistema em consideração e, por exemplo, interações que incluam um caroço repulsivo (uma partícula interage fortemente com outra parti

cula vizinha) devem ser excluídas. Sabemos que um potencial que descreva a interação simultânea dos n-corpos (n>2) é difícil de ser obtido. O que se faz usualmente é representar a interação real entre os constituintes do sistema por somas de interações entre dois corpos, três corpos ou mais.

O método de Hartree-Fock permite incluir potenciais que representem interações entre três ou mais corpos, mas usualmente trabalha-se com potenciais entre dois corpos principalmente devido a que tais cálculos são mais simples.

Para contornar a dificuldade que ocorre no método de Hartree-Fock para potenciais com caroços repulsivos um dos procedimentos adotados é usar potenciais dependentes de velocidade¹⁵⁾ ou, o que é equivalente, potenciais não locais ou separáveis, que reproduzam os deslocamentos de fase nucleon-nucleon mas não possuam caroços repulsivos.

II.1.1 Obtenção das Equações de Hartree-Fock

Existem diversas maneiras de obter as equações de Hartree-Fock. Vamos utilizar o tratamento de Bouten¹⁶⁾, que se baseia no princípio variacional para a energia.

A função de onda que descreve um sistema de A férmions independentes é dada por um determinante de Slater construído a partir de A funções de partícula única $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_A$:

$$\Psi(1, 2, \dots, A) = \frac{1}{\sqrt{A!}} \begin{vmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \dots & \psi_1(A) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \dots & \psi_2(A) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_A(1) & \psi_A(2) & \dots & \psi_A(A) \end{vmatrix} \quad (II.1)$$

A melhor escolha do determinante normalizado de Slater Ψ , no sentido de que ele minimize o valor esperado do Hamiltoniano H, dá:

$$\delta \langle \Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (II.2)$$

Como as variações de Ψ e Ψ^* são independentes:

$$\langle \delta\Psi | H | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{II.3})$$

$$\langle \Psi | H | \delta\Psi \rangle = 0 \quad (\text{II.4})$$

Como H é hermitiano, estas duas equações são equivalentes e é suficiente impor que a equação (II.3) seja satisfeita.

A notação a ser utilizada é a seguinte: ψ_λ ou ψ_μ ($\lambda, \mu = 1, \dots, A$) representam funções de onda de partícula única que ocorrem em Ψ (correspondem a estados ocupados); ψ_σ ou ψ_τ ($\sigma, \tau > A$) representam funções de onda de partícula única correspondentes a estados não ocupados. Observemos que o conjunto total de estados ocupados e não ocupados forma uma base completa para o espaço de Hilbert de estados de uma partícula.

Se as funções de onda de partícula única $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_A$ sofrem variações $\delta\psi_1, \delta\psi_2, \dots, \delta\psi_A$ o determinante de Slater Ψ , que representaremos simbolicamente por

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{A!}} |\psi_1 \psi_2 \dots \psi_A|$$

terá como variação:

$$\delta\Psi = \frac{1}{\sqrt{A!}} |\psi_1 + \delta\psi_1 \psi_2 + \delta\psi_2 \dots \psi_A + \delta\psi_A| - \frac{1}{\sqrt{A!}} |\psi_1 \psi_2 \dots \psi_A|$$

Se considerarmos somente variações de primeira ordem obteremos:

$$\delta\Psi = \sum_{\lambda=1}^A \frac{1}{\sqrt{A!}} |\psi_1 \psi_2 \dots \delta\psi_\lambda \dots \psi_A| \quad (\text{II.5})$$

Expandindo $\delta\psi_\lambda$ em termos da base completa

$\{\psi_\mu, \psi_\sigma\}$

$$\delta\psi_\lambda = \sum_{\mu=1}^A \eta_\mu^\lambda \psi_\mu + \sum_{\sigma>A} \eta_\sigma^\lambda \psi_\sigma \quad (\text{II.6})$$

e chamando

$$\psi_{\lambda}^{\mu} = \frac{1}{\sqrt{A!}} |\psi_1 \psi_2 \dots \psi_{\mu} \dots \psi_A| = \delta_{\lambda\mu} \Psi \quad (\text{II.7})$$

o determinante de Slater obtido a partir de Ψ ao substituir ψ_{λ} por ψ_{μ} , obtêm-se:

$$\delta\Psi = \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\mu=1}^A \eta_{\mu}^{\lambda} \psi_{\lambda}^{\mu} + \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} \eta_{\sigma}^{\lambda} \psi_{\lambda}^{\sigma} \quad (\text{II.8})$$

Usando a relação (II.8), a relação de ortogonalidade entre Ψ e $\delta\Psi$, pode ser escrita como:

$$\sum_{\lambda=1}^A \sum_{\mu=1}^A \eta_{\mu}^{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\mu} | \Psi \rangle + \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} \eta_{\sigma}^{\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\sigma} | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{II.9})$$

Como $\langle \psi_{\lambda}^{\sigma} | \Psi \rangle = 0$ cada parcela conterá um produto de funções de onda de partícula única que envolverá ψ_{σ} e outras ψ_{λ} 's com $\sigma>A$, $\lambda<A$; usando a relação (II.7) podemos escrever:

$$\sum_{\lambda=1}^A \eta_{\lambda}^{\lambda} = 0 \quad (\text{II.10})$$

e

$$\delta\Psi = \sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} \eta_{\sigma}^{\lambda} \psi_{\lambda}^{\sigma} \quad (\text{II.11})$$

Introduzindo a expressão para $\delta\Psi$ obtida em (II.11), na condição (II.3), obtêm-se:

$$\sum_{\lambda=1}^A \sum_{\sigma>A} \eta_{\sigma}^{*\lambda} \langle \psi_{\lambda}^{\sigma} | H | \Psi \rangle = 0$$

Como os η_{σ}^{λ} são arbitrários, resulta:

$$\langle \psi_{\lambda}^{\sigma} | H | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{II.12})$$

para todo $\lambda \leq A$, $\sigma > A$

que é a chamada condição de Brillouin. Esta condição significa que o Hamiltoniano H tem elementos de matriz nulos entre o estado de Hartree-Fock Ψ e os estados de uma partícula e um furo ψ_{λ}^{σ} .

Consideremos agora o Hamiltoniano H e suponhamos que ele consista de uma parte com operadores de uma partícula (que só agem sobre estados de uma partícula) e uma parte com operadores de duas partículas. Escrevemos:

$$H = H_1 + H_2 = \sum_{i=1}^A H_1(i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A H_2(i, j)$$

Introduzindo o Hamiltoniano H na condição de Brillouin, resulta:

$$\sum_{i=1}^A \langle \psi_{\lambda}^{\sigma} | H_1(i) | \Psi \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j=1}^A \langle \psi_{\lambda}^{\sigma} | H_2(i, j) | \Psi \rangle = 0 \quad (\text{II.13})$$

Expressando Ψ e ψ_{λ}^{σ} em termos de funções de onda de uma partícula, e levando em consideração as características dos operadores H_1 e H_2 , esta relação fica:

$$\langle \sigma | H_1 | \lambda \rangle + \sum_{\mu=1}^A \langle \sigma \mu | H_2(1-P) | \lambda \mu \rangle = 0 \quad (\text{II.14})$$

onde P é o operador permutação de duas partículas e $\psi_{\lambda} \equiv | \lambda \rangle$.

Esta condição é chamada condição de Hartree-Fock e usualmente é escrita da seguinte forma:

$$\langle \sigma | h | \lambda \rangle = 0 \quad (\text{II.15})$$

onde h é o Hamiltoniano de Hartree-Fock, definido através de seus elementos de matriz entre dois estados de uma partícula:

$$\langle a|h|b\rangle \equiv \langle a|H_1|b\rangle + \sum_{\mu=1}^A \langle a\mu|H_2(1-P)|b\mu\rangle$$

O Hamiltoniano de Hartree-Fock h é um operador de uma partícula que depende dos A estados de partícula única ocupados. Para que esta dependência fique mais explícita usaremos a notação $h\{\psi_1\psi_2 \dots \psi_A\}$. A condição de Hartree-Fock, expressa na relação (II.15), impõe que as A funções de onda de partícula única sejam tais que o operador h construído a partir delas não tenha elementos de matriz entre estados de partícula única ocupados e não ocupados.

Podemos escrever a condição (II.15) também como um conjunto de A equações operacionais acopladas:

$$h\{\psi_1 \dots \psi_A\} \psi_\lambda = \sum_{\mu=1}^A e_{\lambda\mu} \psi_\mu \quad (\lambda=1,2,\dots,A)$$

onde os $e_{\lambda\mu}$ formam uma matriz de auto-valores.

Devido à liberdade na escolha das funções de onda de partícula única ψ_λ , podemos introduzir uma restrição adicional sobre elas, sem que o determinante de Slater seja alterado. Impomos que as funções sejam escolhidas de modo que a matriz de auto-valores $e_{\lambda\mu}$ seja diagonal. Isto sempre é possível pois os $e_{\lambda\mu}$ formam uma matriz hermitiana. Desta maneira, obtém-se a forma canônica das equações de Hartree-Fock:

$$h\{\psi_1 \dots \psi_A\} \psi_\lambda = \epsilon_\lambda \psi_\lambda \quad (\lambda=1,\dots,A) \quad (\text{II.16})$$

Estas equações formam um problema de auto-valores não linear, e as funções de partícula única ψ_λ , que não conhecemos, ocorrem também na definição do Hamiltoniano de Hartree-Fock. As ψ_λ devem ser auto-funções do operador h que, por sua vez, é construído a partir das ψ_λ . Isto caracteriza o problema de auto-consistência.

II.1.2 Solução das Equações de Hartree-Fock

Consideremos o Hamiltoniano

$$H = T + V$$

sendo T a energia cinética e V a energia de interação entre dois corpos.

As equações canônicas de Hartree-Fock sendo apenas uma condição para que a energia seja estacionária, tem muitas soluções. Pode-se mostrar que estas equações tem sempre um número infinito de soluções. A dificuldade reside em determinar a solução que fornece a menor energia.

Normalizemos as ondas planas ã

$$\langle \underline{k}_i | \underline{k}_j \rangle = \delta_{ij}$$

pela consideração usual de um volume de normalização cúbico e condições de contorno periódicas.

Nesta secção, estamos chamando $H_1 = T$, $H_2 = V$ e caracterizando os estados de partícula única por seus números de onda k.

Portanto, a equação definitória de h fica:

$$\langle \underline{k}_i | h | \underline{k}_j \rangle = \langle \underline{k}_i | T | \underline{k}_j \rangle + \sum_{\mu=1}^A \langle \underline{k}_i \underline{k}_\mu | V(1-P) | \underline{k}_j \underline{k}_\mu \rangle \quad (\text{II.17})$$

Observemos que $h \equiv h\{\underline{k}_1, \underline{k}_2, \dots, \underline{k}_A\}$.

Considerando que V comuta com o momentum total teremos:

$$\langle \underline{k}_i | h | \underline{k}_j \rangle = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} \delta_{ij} + \delta_{ij} \sum_{\mu=1}^A \langle \underline{k}_i \underline{k}_\mu | V(1-P) | \underline{k}_j \underline{k}_\mu \rangle$$

Chamando

$$\epsilon_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} + \sum_{\mu=1}^A \langle \underline{k}_i \underline{k}_\mu | V(1-P) | \underline{k}_i \underline{k}_\mu \rangle$$

podemos escrever a (II.17) como:

$$\langle \underline{k}_i | h\{\underline{k}_1, \underline{k}_2, \dots, \underline{k}_A\} | \underline{k}_j \rangle = \epsilon_i \delta_{ij}$$

o que mostra que qualquer conjunto de A ondas planas é uma solução das equações canônicas de Hartree-Fock.

Tendo em vista que estamos interessados em encontrar a solução das equações de Hartree-Fock que fornece a menor energia total, calculamos a energia total para este caso:

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle = \sum_{\lambda=1}^A \frac{\hbar^2 k_{\lambda}^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda \neq \mu=1}^A \langle k_{\lambda} k_{\mu} | V(1-P) | k_{\lambda} k_{\mu} \rangle$$

Dentre todas as soluções de onda plana, espera-se que a solução Hartree-Fock mais baixa (no sentido da energia, naturalmente) seja obtida com as A ondas planas que tenham menor energia cinética. Usualmente se supõe que esta solução será também a de mais baixa energia, entre todas as soluções de Hartree-Fock, no caso de sistemas infinitos como, por exemplo, a matéria nuclear. Entretanto, não há prova deste fato e pode-se obter soluções com menor energia, também no caso de sistemas infinitos, para tipos especiais de interações.

No caso de núcleos finitos, é óbvio que a solução onda plana não fornecerá a menor energia, pois as partículas interagem muito pouco quando estão distribuídas por todo o espaço. Em cálculos práticos para encontrar uma solução com menor energia, usa-se um procedimento iterativo. Faz-se uma escolha de funções de onda de partícula única, a que chamamos de $\psi_{\lambda}^{(1)}$ e calcula-se $h\{\psi_{\lambda}^{(1)}\}$. A seguir calculam-se os auto-valores e as auto-funções.

Chamamos de $\psi_1^{(2)}, \psi_2^{(2)}, \dots, \psi_A^{(2)}$ as A auto-funções mais baixas; com elas construímos $h\{\psi_{\lambda}^{(2)}\}$. Este novo operador é diagonalizado, suas A auto-funções mais baixas são escolhidas e o processo é repetido até que se obtenha auto-consistência, isto é, até que os ψ_{λ} em duas etapas consecutivas difiram por um valor préfixado.

A razão para escolher as auto-funções mais baixas de $h\{\psi_{\lambda}\}$ em cada etapa da iteração, é que se espera que este conjunto forneça a menor energia total $\langle \Psi | H | \Psi \rangle$ em cada etapa. Esta escolha não é necessária para obter a solução

das equações canônicas de Hartree-Fock, mas se espera que ajude a encontrar a solução de menor energia.

Este processo de iteração é, entretanto, muito trabalhoso. Nos cálculos práticos o problema pode ser simplificado em uma (ou ambas) das seguintes maneiras: 1) corte do espaço de Hilbert de uma partícula; 2) restrições de simetria.

II.1.3 A Energia de Separação no Método de Hartree-Fock

Aplicar o método de Hartree-Fock ao núcleo implica em resolver o sistema de equações (II.16). Observemos que para resolver tal sistema deveríamos conhecer exatamente o potencial, o que em geral não ocorre.

Introduzindo a notação:

$$T_{ij} = \int d^3x \psi_i^*(x) T \psi_j(x)$$

$$V_{ij,kl} = \int d^3x_1 d^3x_2 d^3x'_1 d^3x'_2 \psi_i^*(x_1) \psi_j^*(x_2) V(x_1, x_2; x'_1, x'_2) \psi_k(x'_1) \psi_l(x'_2)$$

podemos escrever os auto-valores ϵ_i das equações de Hartree-Fock (II.16) como

$$\epsilon_i = T_{ii} + \sum_j n_j (V_{ij,ij} - V_{ij,ji})$$

onde n_j é o número de ocupação do estado ψ_j ($n_j = 1, 0$).

A energia total, então, pode ser escrita como:

$$E_{HF} = \sum_i n_i T_{ii} + \frac{1}{2} \sum_{ij} n_i n_j (V_{ij,ij} - V_{ij,ji})$$

A energia de separação Q_1 necessária para remover adiabaticamente o nucleon i do núcleo, pode ser obtida resolvendo o problema de Hartree-Fock para o núcleo inicial e para o núcleo final:

$$Q_1 = - (E_{HF}(A) - E_{HF}(i, A-1))$$

Pode-se escrever:

$$E_{HF}(i, A-1) = \bar{E}_{HF}(i, A-1) - \Delta_x^i$$

onde $\bar{E}_{HF}(i, A-1)$ é a energia total calculada para o sistema de $A-1$ partículas e um furo supondo que para este sistema se ja válida a solução do problema de Hartree-Fock de A partículas e Δ_x^i é a energia que leva em conta o fato de que as funções de partícula única que constituem $E_{HF}(i, A+1)$ e $E_{HF}(i, A-1)$ são diferentes (mas as que constituem $E_{HF}(A)$ e $\bar{E}_{HF}(i, A-1)$ são supostas iguais). Δ_x^i é chamada¹⁷⁾ de "energia de rearranjo orbital" e depende da partícula que foi removida do núcleo.

Podemos, pois, escrever Q_i como

$$Q_i = - (E_{HF}(A) - \bar{E}_{HF}(i, A-1) + \Delta_x^i)$$

O teorema de Koopman¹⁷⁾ afirma que se as funções de onda de partícula única em sistemas de A e de $A-1$ partículas são idênticas:

$$E_{HF}(A) - \bar{E}_{HF}(i, A-1) = \epsilon_i$$

Portanto:

$$Q_i = - (\epsilon_i + \Delta_x^i)$$

Observemos que, neste modelo, as energias de partícula única são iguais, a menos de um sinal, às energias de separação das partículas correspondentes, se não há rearranjo orbital. Então podemos encarar Δ_x^i como uma correção a uma energia de separação que fosse definida, simplesmente, pelo teorema de Koopman. Observa-se de estimativas numéricas que o valor de Δ_x^i é bem menor que o de ϵ_i e que, portanto, no método de Hartree-Fock, a contribuição dominante à energia de separação provém dos auto-valores ϵ_i das equações de Hartree-Fock.

Nas tabelas I e II apresentamos alguns resultados recentes de cálculos de Hartree-Fock. Foram escolhidos dentre os núcleos finitos, devido ao grande número de cálculos com eles realizados, os núcleos duplamente mágicos ^{16}O e ^{40}Ca . Apresentaremos os resultados dos cálculos teóricos dos seguintes autores:

- 1) Nemeth e Vautherin⁽¹⁸⁾ (NV), que realizaram cálculos para alguns núcleos usando uma interação dependente de densidade, obtida do potencial com caroço repulsivo de Reid, na aproximação de densidade local;
- 2) Krieger⁽¹⁹⁾ (K), que realizou cálculos para núcleos par-par com $N=Z$ de $A=4$ até $A=40$, usando uma interação dependente de velocidade que contém termos tensorial e spin-órbita;
- 3) Nemeth e Ripka⁽²⁰⁾ (NR), que realizaram cálculos para núcleos desde ^{16}O até ^{208}Pb na aproximação de densidade local, usando dois tipos distintos de forças (α e β);
- 4) Vautherin e Brink⁽²¹⁾ (VB), que realizaram cálculos para núcleos esféricos usando a interação nucleon-nucleon efetiva dependente de densidade sugerida por Skyrme, para duas escolhas dos parâmetros que especificam esta interação (forças I e II);
- 5) Rouben e Saunier⁽²²⁾ (RS), que realizaram cálculos para diversos núcleos esféricos, do ^4He ao ^{208}Pb , usando interações semi-reais brandas de Saunier e Pearson (SP1 e SP 2);
- 6) Ehlers e Moszkowski⁽²³⁾ (EM), que realizaram cálculos para núcleos com camadas duplamente fechadas usando uma interação δ modificada, dependente da densidade (relacionada com a interação de Skyrme, mas apresentando apenas três parâmetros livres).

TABELA I

Energias de separação (em MeV) para o ^{16}O , experimentais e calculadas pelo método de Hartree-Fock.

	$1s_{1/2}$		$1p_{3/2}$		$1p_{1/2}$	
	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton
Experimental		44,0 ³⁾		19,0 ³⁾	15,67 ⁴⁴⁾	12,4 ³⁾ 12,13 ⁴⁴⁾
N V 18)	34,3	30,5	19,4	15,9	14,8	11,3
K 19)		47		21		15
N R 20) (força α)	35,04	30,33	21,00	16,55	15,70	11,44
N R 20) (força β)	34,46	30,46	20,53	16,70	14,61	10,82
V B 21) (força I)	32,96	28,76	20,81	16,77	13,84	9,94
V B 21) (força II)	42,22	38,01	22,22	18,28	16,80	12,97
R S 22) (SP1)		45,0		17,7		14,3
R S 22) (SP2)		53,7		22,9		17,5
E M 23)	45,6	41,3	22,7	18,7	16,5	12,7

TABELA II

Energias de separação (em MeV) para o ^{40}Ca , experimentais e calculadas pelo método Hartree-Fock

	$1s_{1/2}$		$1p_{3/2}$		$1p_{1/2}$		$1d_{5/2}$		$2s_{1/2}$		$1d_{3/2}$	
	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton
Experimental		*51,0 ³⁾		*36 ³⁾		*30 ³⁾		15,0 ³⁾		10,8 ³⁾	15,62 ⁴⁴⁾	8 ³⁾ 8,33 ⁴⁴⁾
V ¹⁸⁾	45,3	37,7	33,2	26,0	30,1	22,8	20,8	13,8	16,9	9,8	15,5	8,6
19)		73		46		41		23		18		16
R ²⁰⁾ (força α)	45,94	37,59	34,39	26,42	31,01	22,99	22,26	14,60	17,59	9,94	16,38	8,77
R ²⁰⁾ (força β)	44,48	36,39	33,38	25,56	29,72	22,01	21,62	14,20	16,32	8,87	15,21	7,85
B ²¹⁾ (força I)	41,04	32,84	32,17	24,18	28,44	20,51	22,16	14,37	15,67	7,88	14,95	7,31
B ²¹⁾ (força II)	55,33	47,11	39,22	31,30	36,08	28,23	23,26	15,67	17,08	9,57	17,53	10,10
S ²²⁾ (SP1)		67,0		39,9		37,6		16,2		12,4		12,4
S ²²⁾ (SP2)		78,1		46,7		43,8		19,1		13,8		14,2
M ²³⁾	62,2	53,6	42,8	34,7	39,0	30,8	24,5	16,8	18,0	10,4	17,7	10,1

valores arbitrados a partir dos dados experimentais existentes.

II.2 Teoria de Brueckner

O estudo da matéria nuclear, através do chamado modelo do par independente, muito contribuiu para o desenvolvimento do estudo do núcleo. O que Brueckner (além de outros) faz, na chamada teoria de Brueckner²⁴⁾, é estudar a matéria nuclear e, depois, aplicar o mesmo tipo de desenvolvimento e hipóteses básicas ao estudo dos núcleos finitos. A interação entre dois nucleons (utilizada nesta teoria) é uma interação fenomenológica, no sentido de que é ajustada para concordar com os dados experimentais de espalhamento. A formulação matemática da teoria de Brueckner baseia-se na teoria de Watson²⁵⁾ para o espalhamento múltiplo.

Nesta teoria, calculam-se as propriedades dos núcleos complexos em termos da interação nucleon-nucleon livre através da introdução da matriz reação de Brueckner para o espalhamento de dois nucleons. A matriz reação é uma conveniente aproximação, de mais baixa ordem, para a interação efetiva do modelo de camadas. Embora ao estudar o núcleo se utilize a interação entre dois nucleons livres, este estudo se distingue do de um problema de espalhamento, devido ao fato de que, ao estudarmos o sistema nuclear, o princípio de Pauli deve ser respeitado e também devido aos valores de energia fora da camada. Como estados com momentum até o momentum de Fermi estão ocupados (em um núcleo no seu estado fundamental), os nucleons só podem ser excitados para estados que tenham momentum maior do que o de Fermi²⁶⁾. Então, devido ao princípio de Pauli não há colisões, exceto para distâncias muito pequenas (momenta grandes), pois neste caso, como as variações de momentum são grandes, há possibilidade de espalhamento para estados não ocupados. Portanto, exceto para distâncias pequenas (da ordem de 1 fm), é possível dizer que a função de onda que descreve o par em interação é praticamente igual à função de onda das partículas livres e assim, substituir a interação nucleon-nucleon real pela interação nucleon-nucleon livre é uma boa aproximação.

A introdução da matriz reação, cujos elementos em geral são finitos, contorna o problema de potenciais com caroços repulsivos.

A teoria de Brueckner tenta obter, a partir da interação entre dois nucleons, de uma forma auto-consistente, o potencial comum em que cada nucleon se move. Mas, devido ao fato de ser muito difícil computacionalmente resolver tal problema de auto-consistência, muitas aproximações são realizadas durante o desenvolvimento de tais cálculos.

II.2.1 Matriz Reação

Seja v o potencial de interação entre dois nucleons. Brueckner introduz a matriz reação K para o espalhamento de dois nucleons:

$$K = v + v Q/e K \quad (\text{II.18})$$

onde Q é um operador de projeção que exclui, dos estados intermediários do espalhamento de dois nucleons, aqueles que estejam ocupados e e , um denominador de energia que se origina no fato de, quanto maior a diferença de energia entre os estados intermediários, menor ser o tempo de vida do estado virtual e menor sua contribuição a K .

Considerando o espalhamento de dois nucleons do estado inicial ij para o estado final $i'j'$, podemos escrever

$$\begin{aligned} \langle i'j' | K | ij \rangle &= \langle i'j' | v | ij \rangle_N + \\ &+ \sum_{i''j''} \langle i'j' | v | i''j'' \rangle_N Q/e \langle i''j'' | K | ij \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.19})$$

onde N indica que os elementos de matriz devem ser calculados entre os estados inicial e final especificados no núcleo, descritos por funções de onda antisimétricas na for-

ma de determinantes de Slater. Além disto, o elemento de matriz $\langle i'j' | v | ij \rangle_N$ é nulo se $i = j$ ou $i' = j'$ ou se qualquer um dos estados i, j, i', j' é o mesmo que um dos estados ocupados por um outro nucleon do núcleo (efeito do princípio de Pauli); se ele for não nulo será dado por:

$$\langle i'j' | v | ij \rangle_N = \langle i'j' | v | ij \rangle_P - \langle j'i' | v | ij \rangle_P$$

P indicando que não levamos em conta a presença de outros nucleons do núcleo, a não ser os que estão em interação, ou seja:

$$\langle i'j' | v | ij \rangle_P = \int \phi_{i'}^*(\underline{x}_1) \phi_{j'}^*(\underline{x}_2) v(\underline{x}_1, \underline{x}_2) \phi_i(\underline{x}_1) \phi_j(\underline{x}_2) d^3r_1 d^3r_2$$

sendo $\phi_1(\underline{x})$ funções de onda de uma partícula que satisfazem a equação de Schrödinger:

$$\frac{1}{2M} \nabla^2 \phi_1(\underline{x}) + E_1 \phi_1(\underline{x}) = \int d^3r' \langle \underline{x}' | v | \underline{x} \rangle \phi_1(\underline{x}') \quad (\text{II.20})$$

Esta equação representa o movimento de um nucleon do núcleo no potencial comum $v(\underline{x}, \underline{x}')$. Observemos que o potencial, nesta teoria, é suposto como uma matriz potencial, ao invés de um potencial só dependente de posição como é suposto na teoria de Hartree-Fock: $v(\underline{x}, \underline{x}') = v(\underline{x}) \delta(\underline{x} - \underline{x}')$. Esta hipótese mais geral sobre o potencial é necessária, pois, dos resultados da teoria de Brueckner para a matéria nuclear, observa-se que os elementos diagonais de v em uma representação de momentum dependem fortemente de k , o que implica em ser o potencial dependente de velocidade. Potenciais dependentes de velocidade podem, no espaço ordinário, ser representados por uma matriz potencial não local. Tal potencial de partícula única $v(\underline{x}, \underline{x}')$ fica determinado através dos elementos diagonais da matriz reação K :

$$v(\underline{x}, \underline{x}') = \langle \underline{x}' | v | \underline{x} \rangle = \sum_i \phi_i^*(\underline{x}') \sum_j [\langle ij | K | ij \rangle - \langle ij | K | ji \rangle] \phi_j(\underline{x}) \quad (\text{II.21})$$

O denominador de energia, $-e$, é a diferença entre a energia do núcleo quando os nucleons ocupam os estados i' e j' (e os estados i e j não estão ocupados) e a energia do núcleo quando os estados ocupados são i e j (os estados i' e j' não estão ocupados)

$$-e = E_N(i',j') - E_N(i,j)$$

Bethe²⁷⁾, usando as técnicas de Brueckner e Levinson²⁴⁾ e de Eden²⁸⁾ mostrou que a energia de uma configuração nuclear em que os estados i estão ocupados é dada por:

$$E \approx \sum_i \langle i|T|i \rangle + \sum_{ij} \langle ij|K|ij \rangle + w_c \quad (\text{II.22})$$

onde T é o operador energia cinética de um nucleon e w_c é uma contribuição constante de energia, que é aproximadamente a mesma para os estados de baixa excitação.

Pode-se mostrar que a energia de excitação $-e_{i',j',ij}$ dos nucleons nos estados i e j , na presença de todos os outros nucleons é dada por:

$$-e_{i',j',ij} = \epsilon_{i',j',ij} + \delta K_{i',j',ij}$$

onde

$$\epsilon_{i',j',ij} = \langle i'|T|i' \rangle + \sum_{\kappa \neq i'} \langle i'\kappa|K|i'\kappa, ij \text{ não ocupados}, j' \rangle -$$

$$-\langle i|T|i \rangle - \sum_{\kappa \neq i} \langle i\kappa|K|i\kappa \rangle + \langle j'|T|j' \rangle + \sum_{\kappa \neq j'} \langle j'\kappa|K|j'\kappa, ij \text{ não ocupados}, i' \rangle -$$

$$-\langle j|T|j \rangle - \sum_{\kappa \neq j} \langle j\kappa|K|j\kappa \rangle \quad (\text{II.23})$$

e

$$\delta K_{i',j',ij} = \langle i'j'|K|i'j' \rangle - \langle i'j|K|i'j \rangle - \langle ij'|K|ij' \rangle + \langle ij|K|ij \rangle$$

Observemos que na expressão (II.23) ocorrem dois tipos de elementos de matriz reação K , estando explicitamente indica

dos os estados ocupados e não ocupados, dos quais dependem os seus valores em cada caso.

Como a parcela $\delta K_{i'j',ij}$ envolve interações apenas entre pares de nucleons, ao passo que $\epsilon_{i'j',ij}$ envolve interações entre um nucleon e A outros nucleons, pode-se desprezar a contribuição de $\delta K_{i'j',ij}$ frente à de $\epsilon_{i'j',ij}$, já que a primeira é de ordem $\frac{1}{A}$ comparada com a segunda. Portanto, considera-se

$$\epsilon_{i'j',ij} \approx \epsilon_{i'j',ij} \quad (II.24)$$

Representando por $\bar{i} \bar{j}$ os estados não ocupados, pode-se mostrar que os elementos da matriz reação satisfazem a seguinte equação integral:

$$\langle i''k'' | K | i'k; \bar{i}\bar{j}; j' \rangle = \langle i''k'' | v | ik \rangle_N - \sum \langle i''k'' | v | i''k'' \rangle_N \frac{O_{ik}}{\epsilon_{i''j''k''; ijk}} \langle i''k'' | K | i'k; \bar{i}\bar{j}; j' \rangle$$

onde $\epsilon_{i''j''k''; ijk}$ é definido de forma análoga à equação (II.23) mas com contribuições adicionais provenientes do terceiro par de índices.

A energia de um nucleon no estado i é dada por

$$E_i = \langle i | T | i \rangle + \sum_{k \neq i} \langle ik | K | ik \rangle \quad (II.25)$$

Logo,

$$\epsilon_{i'j',ij} \approx E_{i'} + E_j - E_i - E_j \quad (II.26)$$

pois na expressão (II.23) ocorrem dois tipos distintos de elementos da matriz reação K: um deles depende de estados desocupados e de estados ocupados, ao passo que o outro é tal que todos os estados estão ocupados. Chamando esta dife

rença de $\delta E_{i'j';ij}$, podemos escrever:

$$\epsilon_{i'j';ij} = E_{i'} + E_{j'} - E_i - E_j + \delta E_{i'j';ij} \quad (\text{II.27})$$

$\delta E_{i'j';ij}$ leva em conta as diferenças de energia provenientes de alterações na configuração nuclear.

Usando a aproximação expressa na relação (II.24), podemos reescrever a equação (II.19) como:

$$K_{i'j',ij} = \langle i'j' | K | ij \rangle = \langle i'j' | v | ij \rangle_N - \quad (\text{II.28})$$

$$- \sum_{i''j''} \frac{\langle i'j' | v | i''j'' \rangle_N \langle i''j'' | K | ij \rangle}{\epsilon_{i''j'',ij}}$$

A equação (II.28) é uma das formas da equação de Brueckner-Bethe-Goldstone. Na realidade, as equações (II.28), (II.27) e (II.25) constituem um complexo sistema de infinitas equações integrais acopladas que devem ser resolvidas de forma auto-consistente.

Brueckner e Gammel²⁹⁾ mostraram que esta infinidade de equações pode ser reduzida a uma única, sem aproximações, desde que se introduza um parâmetro com alcance infinito no denominador das equações integrais para as matrizes reação K. Por outro lado, Bethe mostrou²⁷⁾ que algumas vezes é possível na equação (II.27) desprezar o termo $\delta E_{i'j';ij}$.

II.2.2 Teoria de Brueckner dos Núcleos Finitos

A teoria de Brueckner em suas primeiras aplicações limitou-se ao estudo da matéria nuclear. A característica especial da matéria nuclear que simplifica enormemente o problema, e que não ocorre em núcleos finitos, é a de in-

variança translacional. Isto significa que as funções de onda de partícula única são ondas planas, o potencial de partícula única é somente uma função do momentum relativo, e a conservação do momentum elimina muitos termos e simplifica muitos argumentos.

Para núcleos finitos a forma do potencial de partícula única não é conhecida. Espera-se que ele seja mais ou menos como o potencial de Woods-Saxon, que é dado por

$$V = \frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}$$

(empiricamente os parâmetros são³⁰⁾ $R=1,3 A^{1/3}$ fm e $a = 0,5$ a $0,6$ fm) mas, além disto, seja não local.

No estudo da matéria nuclear, como os auto-estados são ondas planas, o chamado problema de auto-consistência de Hartree-Fock não ocorre. Entretanto, um problema de auto-consistência ocorre nos denominadores de energia na equação integral para a matriz K , eq. (II.18) e nas equações que resultam da utilização de (II.20) e (II.21) nas equações (II.28), (II.27) e (II.25).

Este problema foi estudado por diversos autores^{24), 29), 31)}, na aproximação da massa efetiva e por um processo de iteração.

Apresentaremos a seguir um procedimento para o estudo de núcleos finitos, que foi sugerido por Bethe²⁷⁾ e por Brueckner, Gammel e Weitzner³²⁾.

Partindo de um dado conjunto de auto-funções de partícula única ϕ_1^n (a n -ésima iteração), calcula-se o potencial de partícula única $v^{(n)}(\underline{r}, \underline{r}')$, usando a equação (II.21) e resolve-se a equação de Schrödinger (II.20) para o novo conjunto de funções $\phi_1^{(n+1)}$. Em geral, as iterações de ordem n e $n+1$ de ϕ_1 e $v(\underline{r}, \underline{r}')$ não coincidem. O problema de auto-consistência de Hartree-Fock pode ser resolvido por um procedimento de iteração-interpolação, partindo de uma função tentativa e melhorando as funções de onda a cada iteração sucessiva, até que se obtenha auto-consistência. Além disto, ainda há o problema de auto-consistência dos denomi-

nadores de energia, pois a variação das funções de onda de uma partícula $\phi_i^{(n)} \rightarrow \phi_i^{(n+1)}$ também altera as energias de partícula única. A magnitude do problema, ao resolver a auto-consistência acoplada, é tão grande (comparada com as facilidades computacionais disponíveis) que Brueckner, Gammel e Weitzner³²⁾ sugeriram outra aproximação. Nesta, os denominadores de energia na equação integral da matriz K envolvem excitações de um par ligado para estados com momenta maiores do que o momentum de Fermi p_F . Isto corresponde a diferenças de energia grandes, da ordem de 150 a 250 MeV. Portanto, o que é de interesse no problema é prever tais energias corretamente. Os momenta dos nucleons excitados são $p \sim 1,5 p_F$ que, à densidade normal, correspondem a comprimentos de onda $\lambda \sim 0,5$ fm. Supondo que a densidade nuclear varia lentamente em distâncias $r \sim \lambda$, podemos tratar o núcleo finito como um meio uniforme (gás de Fermi) na densidade local $\rho(\underline{r}) = \sum |\phi_i(\underline{r})|^2$ e as energias e funções de onda podem ser calculadas nesta aproximação. Esta aproximação é fundamentada pela evidência de que a função de onda para movimento relativo das partículas aproxima-se rapidamente da forma não perturbada para distâncias > 1 fm com desvios apreciáveis ocorrendo apenas para distâncias de separação menores. Portanto, distâncias de correlação na função de onda são muito pequenas, e $K \approx v$ para $r > 1$ fm, de modo que os efeitos dependentes da correlação na matriz K podem ser determinados pela densidade local, desde que as variações de densidade em distâncias ~ 1 fm sejam pequenas. Em realidade, tendo as forças nucleares um caroço repulsivo, as funções de onda perturbada e não perturbada são necessariamente distintas. Mas, a distância em que esta distinção é efetiva (distância de healing), e portanto em que o caroço repulsivo faz sentir seus efeitos, é pequena se comparada com distâncias típicas (por exemplo, a separação média de dois nucleons na matéria nuclear, que é aproximadamente 1,66 fm).

II.2.3 A Energia de Separação na Teoria de Brueckner

Na teoria de Brueckner a energia total de um sistema de A partículas é dada pela soma, sobre as A partículas, da expressão (II.25), ou seja:

$$E = \sum_i n_i T_{ii} + 1/2 \sum_{ij} n_i n_j (K_{ij,ij} - K_{ij,ji}) \quad (II.29)$$

A energia de separação de uma partícula k removida adiabaticamente de um núcleo é dada pela diferença entre as energias dos sistemas de A e A-1 partículas, dadas pela equação (II.29):

$$Q_k = - (\epsilon_k' + E_k^{(R)})$$

onde

$$\epsilon_k' = T_{kk} + \sum_j n_j (K_{kj,kj} - K_{kj,jk})$$

e $E_k^{(R)}$, a chamada energia de rearranjo, provém do fato de que K depende implicitamente, através do operador projeção e do denominador de energia, do número de ocupação n_k . Esta energia de rearranjo é distinta, em sua origem e significado físico, da energia de rearranjo orbital que ocorre na teoria de Hartree-Fock.

A energia de rearranjo $E^{(R)}$ é nula para $K \sim v$, sendo v uma interação suave (sem caroço repulsivo) entre dois corpos, e, portanto, é uma medida da intensidade das correlações nucleon-nucleon de curto alcance que, na teoria de Brueckner, estão contidas na definição da matriz reação K.

Cálculos numéricos para a matéria nuclear mostraram que $E^{(R)}$ não é desprezível frente a ϵ' . Assim, por exemplo, usando o potencial de dois corpos de Gammel-Thaler, obteve-se³³⁾, para o nucleon menos ligado: $\epsilon' \approx -27$ MeV e $E^{(R)} \approx 12$ MeV.

Se a energia de rearranjo puder ser expressa

como o valor esperado do potencial de rearranjo U_R (que surge porque a matriz K depende das funções de partícula única), então:

$$\epsilon_k = \epsilon_k^i + E_k^{(R)} \quad (\text{II.30})$$

Observemos que a equação (II.30) relaciona os autovalores das equações de Hartree-Fock ϵ_k , com as energias ϵ_k^i , que são energias provenientes do modelo de Brueckner, e com as energias de rearranjo.

Se não existir a relação:

$$E_k^{(R)} = \int d^3x \psi_k^*(x) U_R(x) \psi_k(x)$$

os autovalores das equações de Hartree-Fock não terão significado físico simples e deve-se calcular a energia de separação usando a teoria de Brueckner.

Nas Tabelas III e IV apresentamos alguns resultados recentes de cálculos de energia de separação usando a teoria de Brueckner. Foram escolhidos dentre os núcleos finitos, devido ao grande número de cálculos com eles realizados e para comparar com os resultados da teoria de Hartree-Fock, os núcleos duplamente mágicos ^{16}O e ^{40}Ca . Apresentaremos os resultados, abaixo descritos, dos seguintes autores:

- 1) Köhler e Lin³⁴⁾ (KL), que estudaram o espectro de partícula única de ^{16}O , ^{40}Ca , ^{48}Ca e ^{58}Ni usando métodos de campos auto-consistentes e uma interação efetiva entre dois nucleons quadraticamente dependentes da velocidade;
- 2) Davies e McCarthy³⁵⁾ (DM), que realizaram cálculos para núcleos esféricos usando uma matriz K obtida de um potencial com caroço repulsivo de Reid. A matriz K foi calculada usando um espectro de estados intermediários e um operador de Pauli apropriados para orbitais puramente de oscilador harmônico, com opções que permitiam deslocar todo o espectro ou só os estados mais baixos das energias de oscilador não perturbado. Para o ^{16}O foram apresenta-

dos dois resultados, calculados usando dimensão 6 e $\hbar\omega$ respectivamente igual a 9,5 Mev e 12,5 Mev. Para o ^{40}Ca também foram apresentados dois resultados, um com cálculo renormalizado e outro com cálculo não renormalizado;

- 3) Davies, McCarthy e Sauer³⁶⁾ (DMS), que realizaram cálculos para os núcleos esféricos ^{16}O , ^{40}Ca e ^{208}Pb usando matrizes K que diferem entre si na definição do espectro de partículas. Os resultados apresentados são para espectros de estados intermediários com interação: i) QTO, sendo Q o operador projeção que leva em conta o princípio de Pauli e T o operador energia cinética de dois corpos; ii) oscilador harmônico simples; iii) oscilador deslocado, todos usando valor relativo de j até 2; iv) oscilador harmônico simples incluindo ondas parciais até $j=3$.

TABELA III

Energias de separação do ^{16}O (em MeV) experimentais e calculadas usando a teoria de Brueckner

	$1s_{1/2}$		$1p_{3/2}$		$1p_{1/2}$	
	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton
Experimental		44,0 ³⁾		19,0 ³⁾	15,67 ⁴⁴⁾	12,4 ³⁾ 12,13 ⁴⁴⁾
K L ³⁴⁾	61,76		28,87		18,26	
D M ³⁵⁾ 1)	36,8	34,2	18,4	15,9	15,6	13,2
2)	36,9	34,2	18,3	15,8	15,3	12,9
D M S ³⁶⁾ 1)	36,3	33,3	16,7	13,8	13,1	10,3
2)	34,0	30,9	14,2	11,3	11,0	8,2
3)	38,4	35,2	17,0	14,0	13,3	10,4
4)	33,9	30,9	14,2	11,3	11,0	8,2

TABELA IV

Energias de separação do ^{40}Ca (em MeV) experimentais e calculadas usando a teoria de Brueckner

	$1s_{1/2}$		$1p_{3/2}$		$1p_{1/2}$		$1d_{5/2}$		$2s_{1/2}$		$1d_{3/2}$		
	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	neutron	proton	
Experimental		*51 ³⁾		*36 ³⁾		*30 ³⁾		15,0 ³⁾		10,8 ³⁾	15,62 ⁴⁴⁾	8,0 ³⁾ 8,33 ⁴⁴⁾	
K L ³⁴⁾	81,35		54,29		48,08		29,20		18,60		18,73		
D M ³⁵⁾	1)	54,83	48,22	35,13	28,85	32,41	26,21	17,50	11,54	15,84	9,94	13,41	7,59
	2)	68,2	59,8	45,3	37,4	41,4	33,6	24,7	12,2	21,8	14,3	18,8	11,4
D M S ³⁶⁾	1)	54,3	47,3	35,8	29,2	32,8	26,3	18,2	11,9	15,9	9,7	13,8	7,6
	2)	50,7	43,6	32,3	25,6	29,7	23,1	14,9	8,5	13,1	6,8	11,0	4,8
	3)	57,8	50,6	37,7	30,9	34,7	27,9	18,5	12,0	16,2	9,7	13,9	7,5
	4)	49,9	42,9	31,5	24,8	28,9	22,3	14,3	7,9	12,7	6,4	10,3	4,1

* Valores arbitrados a partir dos dados experimentais existentes.

III. CÁLCULO DA ENERGIA DE SEPARAÇÃO DE NUCLEONS FORTEMENTE LIGADOS

III.1 Energia de Separação Média

Dados de espalhamento a alta energia, como os que se obtêm de experiências de espalhamento $(p,2p)$ e $(e,e'p)$ por exemplo, permitem determinar as energias de separação dos estados furo, fortemente ligados, obtidos nestas reações. Em um modelo de partícula única estas energias são iguais às energias de separação dos estados de partícula única correspondentes. Do ângulo de um estudo teórico, o cálculo da energia de separação depende sensivelmente do potencial nuclear suposto.

Há interesse em cálculos de energias de separação, pois entre os muitos potenciais nucleon-nucleon que reproduzem os dados de espalhamento e as propriedades da matéria nuclear, alguns podem não fornecer bons resultados para as energias de separação. Se isto ocorrer, podemos utilizar cálculos de energias de separação como mais um critério auxiliar na seleção entre os vários potenciais nucleon-nucleon propostos.

Como já vimos no capítulo II, tanto o método de Hartree-Fock, como a teoria de Brueckner permitem calcular energias de separação, mas os problemas computacionais são, em geral, de tal magnitude para núcleos mais complexos, que uma análise mais detalhada de um dado conjunto de núcleos e de algumas de suas energias de separação pode se tornar impraticável.

Nosso objetivo neste trabalho é, supondo válido o modelo de camadas como descrição do sistema nuclear e usando o menor número possível de restrições sobre o potencial nuclear, obter uma expressão para a energia de separação de um nucleon de um determinado estado nuclear. Esta expressão dependerá de parâmetros que, por sua vez, dependem intrinsecamente da forma do potencial nuclear. Nossa intenção é obter tais parâmetros de forma a que o conjunto de energias de separação através deles determinando reproduza o

melhor possível os dados experimentais conhecidos de energias de separação.

Analisaremos nesta secção o trabalho de Brink e Sherman^{37), 38)}, no qual nosso trabalho está baseado. Na secção III.2 apresentaremos o cálculo da energia de separação para um potencial central, usando acoplamento $j-j$, que é mais conveniente para o cálculo da energia de separação para um potencial com acoplamento spin-órbita, assunto da secção III.3.

Brink e Sherman calcularam a energia de separação de um nucleon, a que chamaram de energia de separação média, por ser ela a média estatística das energias de separação para partículas com $j = l + \frac{1}{2}$ e $j = l - \frac{1}{2}$. Note-se que

19) na época em que realizaram este trabalho, somente em núcleos muito leves as medidas experimentais de energias de separação forneciam picos separados no espectro de energia para estados como, por exemplo, $p_{3/2}$ e $p_{1/2}$. Para núcleos a partir do ^{27}Al estes níveis não estavam resolvidos e portanto parecia apropriado, do ponto de vista de dados experimentais, predizer energias de separação médias;

29) do ponto de vista teórico tem-se uma grande simplificação dos cálculos que levam a obter resultados que dependem de apenas alguns parâmetros.

No presente trabalho calculamos não a energia de separação média de um nucleon mas a energia de separação de um nucleon de um estado de momentum angular bem definido, dentro do esquema de níveis possíveis do modelo de camadas.

As diferenças e semelhanças entre o trabalho de Brink e Sherman e o nosso serão ressaltadas mais convenientemente nas secções III.2 e III.3. As hipóteses básicas daquele trabalho são:

1) O Hamiltoniano nuclear H descreve um sistema de A nucleons sujeitos a forças entre dois corpos,

$$H = T + V = \sum_{i=1}^A t_i + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j}^A \sum_j^A v_{ij}$$

onde t_i é a energia cinética do i -ésimo nucleon e v_{ij} é o potencial de interação entre os nucleons i e j .

2) v_{ij} é independente de carga e também suficientemente não singular, de modo que ou seja possível calcular elementos de matriz de duas partículas usando funções de onda de partícula única, ou possa ser submetido a um tratamento (como, por exemplo, o método de separação de Moszkowski-Scott) que permita o cálculo de elementos de matriz.

3) A função de onda nuclear Φ é aproximada por um único ou por uma combinação linear de determinantes de Slater, que satisfaçam as seguintes condições:

a) As funções de onda de partícula única que constituem o determinante de Slater, são funções de onda de oscilador harmônico isotrópico, definidas por um potencial com parâmetro de raio de oscilador harmônico $b = (\hbar/M\omega)^{1/2}$. O parâmetro b é determinado impondo a igualdade entre o valor calculado do raio médio quadrático e o valor experimental.

b) A camada $\rho = 2n + l$ do oscilador da qual o nucleon é removido está completamente preenchida. Usando o formalismo de 2a. quantização, e representando por η_α^+ e η_α os operadores criação e destruição, respectivamente, para os estados de um único nucleon α , podemos escrever tal condição como

$$\eta_\alpha^+ |\Phi\rangle = 0$$

para $|\alpha\rangle = |n l m \sigma \tau\rangle$ na camada do oscilador $\rho = 2n + l$ sendo n o número quântico principal do estado do oscilador, $(l m)$ os números quânticos de momentum angular orbital e $(\sigma \tau)$ os números quânticos de spin e isospin.

c) No estado $|\Phi\rangle$ existe, no máximo, uma camada do oscilador, para cada tipo de nucleon, parcialmente preenchida. As camadas mais baixas do oscilador estão completamente preenchidas e as mais altas completamente vazias.

4) A separação do nucleon é realizada adiabaticamente, ou seja, a separação de um nucleon não afeta os outros nucleons do núcleo. Assim, se o estado inicial do núcleo é descrito por $|\phi_1\rangle = |\Phi\rangle$, e se o nucleon que é arran-

caso do núcleo ocupava neste um estado de partícula única $|\alpha\rangle$, então o estado final do núcleo é descrito por $|\phi_f\rangle = \eta_\alpha |\phi\rangle$.

A diferença de energia entre o estado final e o inicial, ou seja, a energia de separação E_α , será

$$E_\alpha = \langle \phi_f | H | \phi_f \rangle - \langle \phi_i | H | \phi_i \rangle = - \langle \phi | H - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha | \phi \rangle \quad (\text{III.1})$$

De acordo com a hipótese 1) o Hamiltoniano do problema é:

$$H = \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle \eta_{\lambda}^+ \eta_{\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\kappa} \sum_{\lambda} \sum_{\mu} \sum_{\nu} \langle \kappa \lambda | v_A | \mu \nu \rangle \eta_{\kappa}^+ \eta_{\lambda}^+ \eta_{\nu} \eta_{\mu} \quad (\text{III.2})$$

onde

$$\langle \kappa \lambda | v_A | \mu \nu \rangle = \langle \kappa \lambda | v | \mu \nu \rangle - \langle \kappa \lambda | v | \nu \mu \rangle \quad (\text{III.3})$$

Mas, como se mostra no apêndice A,

$$H - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + W_\alpha + \eta_\alpha C + D \eta_\alpha^+ - \eta_\alpha H \eta_\alpha^+$$

onde C e D não contêm η_α ou η_α^+ e $W_\alpha = \sum_{\kappa \mu} \langle \kappa \alpha | v_A | \mu \alpha \rangle \eta_{\kappa}^+ \eta_{\mu}$.

Então,

$$(-E_\alpha) = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + \langle \phi | W_\alpha | \phi \rangle + \langle \phi | \eta_\alpha C | \phi \rangle + \langle \phi | D \eta_\alpha^+ | \phi \rangle - \langle \phi | \eta_\alpha H \eta_\alpha^+ | \phi \rangle$$

Usando a hipótese 3-b), a energia de separação assume a forma:

$$(-E_\alpha) = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + \langle \phi | W_\alpha | \phi \rangle \quad (\text{III.4})$$

Tendo em vista obter-se a energia de separação média \bar{E}_{ρ_1} para um nucleon da camada do oscilador caracterizada por ρ_1 , deve-se fazer uma média sobre os números quânticos orbitais, de spin e de isospin, para todos os estados de partícula única nesta camada. Para tal introduz-se um

"operador de interação média" para o nível ρ_1 , definido por

$$W(\rho_1) = \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \eta_{\beta}^+ \eta_{\gamma} \langle \beta | W_{\rho_1} | \gamma \rangle \quad (\text{III.5})$$

com

$$\langle \beta | W_{\rho_1} | \gamma \rangle = \frac{1}{4[\rho_1]} \sum_{\alpha}^{(\rho_1)} \langle \beta \alpha | v_A | \gamma \alpha \rangle \quad (\text{III.6})$$

e $[\rho_1] = \frac{1}{2} (\rho_1 + 1) (\rho_1 + 2)$ a degenerescência orbital do oscilador. A soma sobre α é realizada sobre todos os estados $|\alpha\rangle \equiv |n\lambda m \sigma \tau\rangle$ de uma partícula que pertençam à camada do oscilador caracterizada por $\rho_1 = 2n + 1$. Então,

$$W(\rho_1) = \frac{1}{4[\rho_1]} \sum_{\alpha}^{(\rho_1)} \sum_{\beta \gamma} \langle \beta \alpha | v_A | \gamma \alpha \rangle \eta_{\beta}^+ \eta_{\gamma} = \frac{1}{4[\rho_1]} \sum_{\alpha}^{(\rho_1)} W_{\alpha}$$

Logo,

$$(-\bar{E}_{\rho_1}) = \sum_{\alpha}^{(\rho_1)} \langle \alpha | t | \alpha \rangle + \frac{1}{4[\rho_1]} \sum_{\alpha}^{(\rho_1)} \langle \alpha | W_{\alpha} | \alpha \rangle$$

ou

$$(-\bar{E}_{\rho_1}) = \langle \rho_1 | t | \rho_1 \rangle + \langle \phi | W(\rho_1) | \phi \rangle \quad (\text{III.7})$$

sendo o elemento de matriz da energia cinética dado por:

$$\langle \rho_1 | t | \rho_1 \rangle = \frac{1}{4} (2\rho_1 + 1) \hbar \omega = \frac{1}{4} (2\rho_1 + 1) \left(\frac{\hbar^2}{M b^2} \right)$$

O operador $W(\rho_1)$ tem o mesmo caráter tensorial que v_A nos espaços orbital, de spin e isospin, pois a definição de $W(\rho_1)$ envolve uma média sobre todos os subestados de spin, isospin e orbitais magnéticos de nível ρ_1 .

Observemos que $W(\rho_1)$, que ocorre na equação (III.7), depende do elemento de matriz $\langle \beta | W_{\rho_1} | \gamma \rangle$. Dentro da representação escolhida, seja:

$$|\beta\rangle = |n_2 l_2 \sigma_2 \tau_2\rangle, \quad |\gamma\rangle = |n'_2 l'_2 m'_2 \sigma'_2 \tau'_2\rangle$$

Então,

$$\langle \beta | W_{\rho_1} | \gamma \rangle = \langle n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2 | W_{\rho_1} | n'_2 l'_2 m'_2 \sigma'_2 \tau'_2 \rangle \quad (\text{III.8})$$

Observemos também que é necessária mais uma especificação para que os cálculos de energia de separação possam prosseguir: é necessário que se especifique o caráter da força de interação.

Brink e Sherman estudam detalhadamente forças centrais, obtendo uma expressão analítica para a energia de separação. Também discutem os casos de forças de interação spin-órbita e tensorial, mas com menos detalhe.

Iniciemos pela consideração de uma força de interação central. Uma força central comporta-se como um escalar tanto no espaço orbital como no espaço de spin, e como $W(\rho_1)$ tem o mesmo caráter tensorial que v_A , concluímos que os elementos de matriz de W_{ρ_1} são diagonais em l, m, σ e independentes de m, σ e τ . Portanto, para forças centrais a relação (III.8) pode ser escrita como

$$\langle \beta | W_{\rho_1} | \gamma \rangle = \delta_{l_2 l'_2} \delta_{m_2 m'_2} \delta_{\sigma_2 \sigma'_2} \delta_{\tau_2 \tau'_2} \langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n'_2 l'_2 \rangle$$

Levando esta expressão à relação (III.5) que define $W(\rho_1)$ obtemos

$$W(\rho_1) = \sum_{n'_2 l'_2 m'_2 \sigma'_2 \tau'_2} \eta_{n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2}^+ \eta_{n'_2 l'_2 m'_2 \sigma'_2 \tau'_2} \langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n'_2 l'_2 \rangle$$

Substituindo na equação (III.7) e usando a hipótese 3-c), obtemos

$$(-\bar{E}_{\rho_1}) = \langle \rho_1 | t | \rho_1 \rangle + \sum_{n_2 l_2} \bar{N}_{n_2 l_2} \langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle \quad (III.9)$$

onde $\bar{N}_{n_2 l_2}$ é o valor esperado do operador número de nucleons no estado orbital $(n_2 l_2)$:

$$\bar{N}_{n_2 l_2} = \sum_{m_2 \sigma_2 \tau_2} \langle \phi | \eta_{n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2}^+ \eta_{n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2} | \phi \rangle$$

Observemos que para calcular a energia de separação \bar{E}_{ρ_1} , dada pela equação (III.9), devemos ainda calcular o elemento de matriz $\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle$.

$$\langle n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2 \rangle = \frac{1}{4[\rho_1]} \quad \times \quad (III.10)$$

$$\sum_{\substack{n_1 l_1 m_1 \\ \sigma_1 \tau_1}} \langle n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 | v_A | n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 \rangle$$

Lembrando que $\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle$ não depende de m_2, σ_2 e τ_2 , obtém-se fazendo a média sobre os estados iniciais e somando sobre os estados finais:

$$\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle = \frac{1}{16(2l_2+1)[\rho_1]} \quad (III.11)$$

$$\sum_{\substack{n_1 l_1 \\ m_1 \sigma_1 \tau_1 \\ m_2 \sigma_2 \tau_2}} \langle n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 | v_A | n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 \rangle$$

Tendo em vista a relação (III.3), v_A pode ser expresso por

$$v_A = v(1 - P_M P_\sigma P_\tau)$$

onde P_M é o operador de troca espacial, P_σ o operador de troca de spin, P_τ o operador de troca de isospin e v uma interação geral central, dada por³⁸⁾

$$v = V_s \frac{(1-P_\sigma)}{2} + V_t \frac{(1+P_\sigma)}{2}$$

onde V_s e V_t são funções apropriadas das coordenadas espaciais relativas de dois nucleons referentes aos estados single e triplete, respectivamente.

Usando as propriedades de separabilidade da força central e as relações

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} \langle \sigma_2 \sigma_1 | \sigma_2 \sigma_1 \rangle = \sum_{\tau_1 \tau_2} \langle \tau_2 \tau_1 | \tau_2 \tau_1 \rangle = 4$$

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} \langle \sigma_2 \sigma_1 | P_\sigma | \sigma_2 \sigma_1 \rangle = \sum_{\tau_1 \tau_2} \langle \tau_2 \tau_1 | P_\tau | \tau_2 \tau_1 \rangle = 2$$

podemos escrever

$$\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle = \frac{1}{(2l_2+1) [\rho_1]} \quad \times$$

$$\times \sum_{n_1 l_1}^{(\rho_1)} \sum_{m_1 m_2} \langle n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1 | \bar{v}_A | n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1 \rangle$$

sendo

$$\bar{v}_A = v_s \left(\frac{1}{4} + \frac{1}{8} P_M \right) + v_t \left(\frac{3}{4} - \frac{3}{8} P_M \right) \quad (\text{III.12})$$

como \bar{v}_A é um operador escalar

$$\begin{aligned} & \sum_{m_1 m_2} \langle n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1 | \bar{v}_A | n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1 \rangle = \\ & = \sum_{\lambda} (2\lambda+1) \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | \bar{v}_A | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda \rangle \end{aligned}$$

Portanto

$$\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle = \frac{1}{(2l_2+1) [\rho_1]} \quad \times$$

$$\times \sum_{n_1 l_1}^{(\rho_1)} \sum_{\lambda} (2\lambda+1) \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | \bar{v}_A | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda \rangle \quad (\text{III.13})$$

O estado $\langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda \rangle$ que descreve dois núcleons em estados orbitais de oscilador harmônico $(n_1 l_1)$, $(n_2 l_2)$ com momenta angulares orbitais acoplados para fornecer o momentum resultante λ , pode ser expresso em termos de estados de movimento relativo (nl) e de centro de massa (nl) pela utilização dos coeficientes ou parênteses de Moshinsky³⁹⁾

$$|n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda\rangle = \sum_{n l n l} |n l, n l, \lambda\rangle \langle n l, n l, \lambda | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda\rangle \quad x$$

$$x \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | \bar{v}_A | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda\rangle =$$

$$= \sum_{n' l' n' l'} \sum_{n l n l} \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | n' l', n' l', \lambda\rangle \quad x$$

$$x \langle n' l', n' l', \lambda | \bar{v}_A | n l, n l, \lambda\rangle \langle n l, n l, \lambda | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda\rangle$$

Como \bar{v}_A é central, isto implica em que $l = l'$ e como \bar{v}_A só depende das coordenadas relativas, $l = l'$, $n = n'$. Além disto, devemos ter $n = n'$, pois os coeficientes de Moshinsky só não são nulos se

$$2n_2 + l_2 + 2n_1 + l_1 = 2n + l + 2n + l$$

Usando ainda o fato de os coeficientes de Moshinsky serem reais, temos

$$\langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | \bar{v}_A | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda\rangle =$$

$$= \sum_{n l n l} \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | n l, n l, \lambda\rangle^2 \langle n l | \bar{v}_A | n l\rangle$$

Logo, a equação (III.13) pode ser escrita como

$$\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2\rangle = \frac{1}{(2l_2 + 1) [\rho_1]} \sum_{n_1 l_1}^{(\rho_1)} \sum_{\lambda} \sum_{n l n l} (2\lambda + 1) \quad x$$

$$x \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | n l, n l, \lambda\rangle^2 \langle n l | \bar{v}_A | n l\rangle \quad \text{(III.14)}$$

Ademais, podemos escrever

$$\bar{v}_A = \bar{v} \left(1 - \frac{1}{4} P_M\right)$$

sendo

$$\bar{v} = \begin{cases} \frac{1}{2} v_s + \frac{1}{2} v_t & \text{para } l \text{ par} \\ \frac{1}{10} v_s + \frac{9}{10} v_t & \text{para } l \text{ impar} \end{cases}$$

Logo

$$\langle n_2 l_2 | W_{\rho_1} | n_2 l_2 \rangle = \frac{1}{(2l_2+1) [\rho_1]} \sum_{\substack{n l n l \\ \lambda n_1 l_1}} (2\lambda+1) \times$$

$$\times \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda | n l, n l, \lambda \rangle^2 \left(1 - \frac{1}{4} (-1)^l\right) v_{n l} \quad (\text{III.15})$$

onde

$$v_{n l} = \langle n l | \bar{v} | n l \rangle$$

Substituindo a relação (III.15) na relação (III.9) obtemos a expressão final para a energia de separação \bar{E}_{ρ_1} :

$$(-\bar{E}_{\rho_1}) = \langle \rho_1 | t | \rho_1 \rangle + \sum_{n_2 l_2} \bar{N}_{n_2 l_2} \frac{1}{(2l_2+1) [\rho_1]} \times$$

$$\times \sum_{\substack{n l n l \\ \lambda n_1 l_1}} (2\lambda+1) \langle n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda | n l, n l, \lambda \rangle^2 \left(1 - \frac{1}{4} (-1)^l\right) v_{n l} \quad (\text{III.16})$$

Observemos novamente que a soma é realizada sobre todos os valores de n, l, n, l, λ e sobre os valores de $n_1 l_1$ que satisfaçam a restrição $2n_1 + l_1 = \rho_1$.

Se conhecemos as intensidades da interação, expressa através dos V_{n_2} , usando a equação (III.16) podemos calcular diretamente a energia de separação de uma partícula da camada do oscilador caracterizada por ρ_1 .

Observando o resultado obtido para forças centrais por Brink e Sherman expresso na equação (III.16), vemos que a energia de separação é independente dos detalhes de acoplamento dos nucleons na última camada não preenchida e depende apenas dos números médios de ocupação, $\bar{N}_{n_2 l_2}$, dos estados orbitais.

Consideremos agora uma força de interação spin-órbita. Uma força deste tipo é um vetor nos espaços de spin e orbital separadamente, mas é um escalar no espaço de spin e orbital combinados. Concluímos que neste caso, os elementos de matriz de W_{ρ_1} não são diagonais em m e σ , mas o serão em j e m_j . Portanto, para forças spin-órbita a relação (III.8) pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \langle n_2 l_2 j_2 m_j \tau_2 | W_{\rho_1}^{S.O.} | n_2' l_2' j_2' m_j' \tau_2' \rangle = \\ = \delta_{l_2 l_2'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m_j m_j'} \delta_{\tau_2 \tau_2'} \langle n_2 l_2 j_2 | W_{\rho_1}^{S.O.} | n_2' l_2' j_2' \rangle \end{aligned}$$

Brink e Sherman não realizam o cálculo da energia de separação média com interação spin-órbita, mas fazem uma estimativa de sua contribuição concluindo ser ela muito pequena.

III.2 - ENERGIA DE SEPARAÇÃO PARA UM POTENCIAL CENTRAL

Nosso objetivo é calcular a energia de separação de uma partícula em um estado caracterizado pelos números quânticos n_1, l_1, j_1 onde n é o número quântico principal, l o número quântico de momentum angular orbital e j o número quântico de momentum angular total.

É conveniente notar que a energia de separação que nos propomos calcular não é a mesma calculada por Brink e Sherman, já que aquela é uma energia de separação média para um nucleon da camada caracterizada por $\rho_1 = 2n_1 + l_1$.

As hipóteses de nosso trabalho são as mesmas que foram utilizadas por Brink e Sherman e que estão relacionadas na seção III.1, com exceção da hipótese 3-b) que passa a ser: "o estado do oscilador caracterizado pelos números quânticos n_1, l_1, j_1 , do qual o nucleon é removido, está completamente preenchido". Usando o formalismo de segunda quantização podemos escrever tal condição como:

$$\eta_{\alpha}^{\dagger} |\Phi\rangle = 0$$

para todos os estados $|\alpha\rangle = |n l j m \tau\rangle$ que tenham os mesmos n, l e j sendo m o número quântico de projeção do momentum angular total e τ o número quântico de isospin.

A energia de separação E_{α} de um nucleon do estado α é dada por:

$$(-E_{\alpha}) = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + \langle \Phi | W_{\alpha} | \Phi \rangle \quad (\text{III.17})$$

sendo:

$$W_{\alpha} = \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \langle \alpha \beta | v_A | \alpha \gamma \rangle \eta_{\beta}^{\dagger} \eta_{\gamma} \quad (\text{III.18})$$

conforme mostramos na seção III.1 e no Apêndice A.

Em analogia com o que fizemos na seção III.1, introduzimos um operador que chamaremos de "operador intera-

ção" para o estado caracterizado por $n_1 l_1 j_1$, e que representamos por $W(n_1 l_1 j_1)$, definido pelas relações:

$$W(n_1 l_1 j_1) = \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \eta_{\beta}^+ \eta_{\gamma} \langle \beta | W(n_1 l_1 j_1) | \gamma \rangle \quad (\text{III.19})$$

$$\langle \beta | W(n_1 l_1 j_1) | \gamma \rangle = \frac{1}{2(2j_1+1)} \sum_{m_1 \tau_1} \langle \beta \alpha | v_A | \gamma \alpha \rangle \quad (\text{III.20})$$

Observemos que $W(n_1 l_1 j_1)$ é o operador interação média sem projeção de j e sem isospin.

Por outro lado, se a energia é independente de m e τ , da relação (III.17) podemos escrever a expressão para a energia de separação de uma partícula do estado $|n_1 l_1 j_1\rangle$, como:

$$(-E_{n_1 l_1 j_1}) = \langle n_1 l_1 j_1 | \epsilon | n_1 l_1 j_1 \rangle + \frac{1}{2(2j_1+1)} \sum_{m_1 \tau_1} \langle \phi | W_{\alpha} | \phi \rangle \quad (\text{III.21})$$

Na expressão acima as somas sobre m_1 e τ_1 não envolvem $|\phi\rangle$.

Substituindo a relação (III.20) na relação (III.19) obtemos:

$$W(n_1 l_1 j_1) = \frac{1}{2(2j_1+1)} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{m_1 \tau_1} \eta_{\beta}^+ \eta_{\gamma} \langle \beta \alpha | v_A | \gamma \alpha \rangle$$

Comparando com a relação (III.18), podemos escrever:

$$W(n_1 l_1 j_1) = \frac{1}{2(2j_1+1)} \sum_{m_1 \tau_1} W_{\alpha}$$

Então:

$$(-E_{n_1 l_1 j_1}) = t_{n_1 l_1 j_1} + \langle \Phi | W(n_1 l_1 j_1) | \Phi \rangle \quad (\text{III.22})$$

onde:

$$t_{n_1 l_1 j_1} = \langle n_1 l_1 j_1 | t | n_1 l_1 j_1 \rangle$$

Vamos trabalhar com o elemento de matriz $\langle \Phi | W(n_1 l_1 j_1) | \Phi \rangle$, já que o cálculo da energia de separação a que nos propomos, reduz-se ao cálculo deste elemento de matriz. Inicialmente examinaremos o comportamento do elemento de matriz $\langle \beta | W(n_1 l_1 j_1) | \gamma \rangle$. Podemos escrevê-lo como:

$$\langle \beta | W(n_1 l_1 j_1) | \gamma \rangle = \langle | W^C(n_1 l_1 j_1) | \rangle + \langle | W^{S.O.}(n_1 l_1 j_1) | \rangle$$

onde os índices superiores c,s.o indicam que os potenciais envolvidos são central e spin-órbita.

A definição de $W(n_1 l_1 j_1)$ envolve uma média sobre m_1 e τ_1 . Podemos dizer que $W(n_1 l_1 j_1)$ tem o mesmo caráter tensorial que v_A nos espaços orbital, de spin e de isospin separadamente.

Se a força é central, e portanto é um escalar no espaço orbital e no de spin e também no espaço combinado, o elemento de matriz de W^C é diagonal em l_2, j_2, m_2 e também em m_1 (se estivermos expressando a função de onda em acoplamento ^2l-s) e independe de m_2 e τ_2 . Portanto, podemos escrever:

$$\begin{aligned} \langle n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2 | W^C(n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' m_2' \tau_2' \rangle = \\ = \delta_{l_2 l_2'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m_2 m_2'} \delta_{\tau_2 \tau_2'} \langle n_2 l_2 j_2 | W^C(n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' \rangle \end{aligned}$$

O elemento de matriz de $W^{S.O.}$, que é originado por uma força do tipo spin-órbita (que é um vetor nos espaços orbital e de spin separadamente, mas um escalar no espaço combinado), é diagonal também em l_2, j_2, m_2 , embora não o seja em m_{l_2} , e independe de τ_2 e m_2 . Portanto, podemos escrever:

$$\begin{aligned} & \langle n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2 | W^{S.O.} (n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' m_2' \tau_2' \rangle = \\ & = \delta_{l_2 l_2'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m_2 m_2'} \delta_{\tau_2 \tau_2'} \langle n_2 l_2 j_2 | W^{S.O.} (n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' \rangle \end{aligned}$$

Então:

$$\langle \beta | W(n_1 l_1 j_1) | \gamma \rangle = \delta_{l_2 l_2'} \delta_{j_2 j_2'} \delta_{m_2 m_2'} \delta_{\tau_2 \tau_2'} \langle n_2 l_2 j_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' \rangle \quad (III.23)$$

onde:

$$W(n_1 l_1 j_1) = W^G(n_1 l_1 j_1) + W^{S.O.}(n_1 l_1 j_1)$$

Logo:

$$W(n_1 l_1 j_1) = \sum_{n_2 n_2' l_2} \eta_{n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2}^+ \eta_{n_2' l_2' j_2' m_2' \tau_2'} \langle n_2 l_2 j_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' \rangle$$

Substituindo a relação acima na equação (III.22) e usando a hipótese 3-c) obtemos:

$$(-E_{n_1 l_1 j_1}) = \epsilon_{n_1 l_1 j_1} + \sum_{n_2 l_2 j_2} \bar{N}_{n_2 l_2 j_2} \langle n_2 l_2 j_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2 l_2 j_2 \rangle \quad (III.24)$$

onde:

$$\bar{N}_{n_2 l_2 j_2} = \sum_{m_2 \tau_2} \langle \phi | n_{n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2}^+ n_{n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2} | \phi \rangle$$

é o valor esperado do número de nucleons no estado caracterizado pelos números quânticos $n_2 l_2 j_2$.

Observemos que a relação (III.24) obtida é análoga à relação (III.9) obtida por Brink e Sherman.

Denominemos

$$F_{n_1 l_1 j_1} = \sum_{n_2 l_2 j_2} \bar{N}_{n_2 l_2 j_2} \langle n_2 l_2 j_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2 l_2 j_2 \rangle \quad (\text{III.25})$$

Para um valor de j_2 fixo e para camadas fechadas é válida a relação:

$$\bar{N}_{n_2 l_2 j_2} = \frac{(2j_2+1)}{2(2l_2+1)} \bar{N}_{n_2 l_2}$$

Logo:

$$F_{n_1 l_1 j_1} = \sum_{n_2 l_2} j_2 \frac{(2j_2+1)}{2(2l_2+1)} \bar{N}_{n_2 l_2} \langle n_2 l_2 j_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2 l_2 j_2 \rangle$$

Trabalhemos com o elemento de matriz

$$H_{n_2 l_2 j_2} = \langle n_2 l_2 j_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2 l_2 j_2 \rangle$$

Da relação (III.20) podemos escrever:

$$\langle n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2' l_2' j_2' m_2' \tau_2' \rangle = \frac{1}{2(2j_1+1)} \sum_{m_1 \tau_1}$$

$$x \langle n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2, n_1 l_1 j_1 m_1 \tau_1 | v_A | n_2' l_2' j_2' m_2' \tau_2', n_1 l_1 j_1 m_1 \tau_1 \rangle \quad (\text{III.27})$$

Como tanto para forças centrais como para forças spin-órbita $H_{n_2 l_2 j_2}$ não depende de m_2 e τ_2 , podemos escrever:

$$H_{n_2 l_2 j_2} = \frac{1}{2(2j_2+1)} \sum_{m_2 \tau_2} \langle n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2 | W(n_1 l_1 j_1) | n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2 \rangle$$

Usando a relação (III.27)

$$H_{n_2 l_2 j_2} = \frac{1}{4(2j_1+1)(2j_2+1)} \sum_{\substack{(n_1 l_1 j_1 \text{ fixos}) \\ m_1, m_2 \\ \tau_1, \tau_2}}$$

$$x \langle n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2, n_1 l_1 j_1 m_1 \tau_1 | v_A | n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2, n_1 l_1 j_1 m_1 \tau_1 \rangle$$

onde os estados estão "desacoplados".

Usando sucessivamente as relações (B-1), (B-2) e (B-3) do apêndice B para calcular $H_{n_2 l_2 j_2}$, obtêm-se a energia de separação, tanto para um potencial central como para um potencial spin-órbita dada pela expressão:

$$-E_{n_1 l_1 j_1} = \epsilon_{n_1 l_1 j_1} + \sum_{n_2 l_2 j_2} \bar{N}_{n_2 l_2} \frac{1}{8(2l_2+1)(2j_1+1)} x$$

($n_1 l_1 j_1$ fixos)

$$x \sum_{\substack{m_1 m_2 \\ \tau_1 \tau_2}} \sum_{\substack{JJ' \\ (M \text{ fixo})}} \sum_{\substack{LS \\ L'S'}} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) (j_1 m_1 j_2 m_2 | J'M) x$$

$$\begin{aligned}
 & \times (2j_1+1)(2j_2+1) |(2L+1)(2L'+1)(2S+1)(2S'+1)|^{1/2} \times \\
 & \times \left\{ \begin{matrix} L' & l_1 & l_2 \\ S' & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J' & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\} \sum_{m_L m_L'} \sum_{m_S m_S'} \sum_{m_{l_1} m_{l_2}} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\sigma_1' \sigma_2'} \times \\
 & \times (L' m_L' S' m_S' | JM) (l_1 m_{l_1}' l_2 m_{l_2}' | L' m_L') (s_1 \sigma_1' s_2 \sigma_2' | S' m_S') \times \\
 & \times (L m_L S m_S | JM) (l_1 m_{l_1} l_2 m_{l_2} | L m_L) (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S) \times \\
 & \times \langle n_2 l_2 m_{l_2}' \sigma_2' \tau_2, n_1 l_1 m_{l_1}' \sigma_1' \tau_1 | v_A | n_2 l_2 m_{l_2} \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_{l_1} \sigma_1 \tau_1 \rangle
 \end{aligned}$$

(III.29)

Consideremos agora apenas o caso em que a força de interação é uma força central. Em todas as grandezas que ocorreram até a equação (III.29) colocaremos um índice superior C para indicar que elas estão sendo calculadas para uma interação central.

Se a força é central,

$$L = L', S = S', m_{l_1}' = m_{l_1}, m_{l_2}' = m_{l_2}, \sigma_1' = \sigma_1, \sigma_2' = \sigma_2$$

Então:

$$H_{n_2 l_2 j_2}^C = \frac{1}{4} \sum_{m_1 M} (n_1 l_1 j_1 \text{ fixos}) \sum_{m_S m_{l_1}} \sum_{JJ'LS} (2L+1)(2S+1) \times$$

$$x \begin{pmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J' & j_1 & j_2 \end{pmatrix} (j_1 m_1 j_2 M-m_1 | JM) x$$

$$x (j_1 m_1 j_2 M-m_1 | J'M) (LM-m_S S m_S | J'M) (LM-m_S S m_S | JM) x$$

$$x (l_1 m_1 l_2 M-m_S-m_1 | LM-m_S)^2 \sum_{\substack{\tau_1 \tau_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S)^2 x$$

$$x \langle n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 \rangle$$

Calculemos

$$L = \sum_{\substack{\tau_1 \tau_2 \\ \sigma_1 \sigma_2}} (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S)^2 x$$

$$x \langle n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_2 \sigma_2 \tau_2, n_1 l_1 m_1 \sigma_1 \tau_1 \rangle$$

Como:

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S)^2 \langle \sigma_1 \sigma_2 | \sigma_1 \sigma_2 \rangle = 1$$

$$\sum_{\sigma_1 \sigma_2} (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S)^2 \langle \sigma_1 \sigma_2 | P_\sigma | \sigma_1 \sigma_2 \rangle = \delta_{m_S, \pm 1}$$

podemos escrever:

$$L = \langle n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1 | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_2, n_1 l_1 m_1 \rangle$$

onde:

$$\bar{v}_A^C = v_s(2+p_M) + v_t(2-p_M) + \delta_{m_S, \pm 1} [-v_s(2+p_M) + v_t(2-p_M)]$$

Observemos que:

$$\bar{v}_A^C(m_S=0) = v_s(2+p_M) + v_t(2-p_M)$$

$$\bar{v}_A^C(m_S = \pm 1) = 2v_t(2-p_M)$$

Estas relações permitem escrever:

$$\bar{v}_A^C = [v_s(2+p_M) + v_t(2-p_M)] \delta_{m_S, 0} + 2v_t(2-p_M) \delta_{m_S, \pm 1}$$

Então:

$$H_{n_2 l_2 j_2}^C = \frac{1}{4} \sum_{\substack{(n_1 l_1 j_1 \text{ fixos}) \\ m_1, M \\ m_S, m_{l_1}}} \sum_{JJ'LS} (2L+1)(2S+1) \times$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J' & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\} (j_1 m_1 j_2^{M-m_1} | JM) \times$$

$$\times (j_1 m_1 j_2^{M-m_1} | J'M) (LM - m_S m_S | J'M) (LM - m_S m_S | JM) \times$$

$$\times (l_1 m_{l_1} l_2^{M-m_S-m_{l_1}} | LM - m_S)^2 \langle n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} \rangle$$

Como, para M fixo:

$$\sum_{m_1} (j_1 m_1 j_2^{M-m_1} | JM) (j_1 m_1 j_2^{M-m_1} | J'M) = \delta_{JJ'}$$

podemos escrever:

$$H_{n_2 l_2 j_2}^C = \frac{1}{4} \sum_{M, m_S, m_{l_1}} (n_1 l_1 j_1 \text{ fixos}) \sum_{J, L, S} (2L+1)(2S+1) \times$$

$$\times \left\{ \begin{matrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{matrix} \right\}^2 (L M - m_S m_S | JM)^2 (l_1 m_{l_1} l_2 M - m_S - m_{l_1} | LM - m_S)^2 \times$$

$$\times \langle n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} \rangle \quad (\text{III.30})$$

Consideremos o elemento de matriz

$\langle n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} \rangle$. Considerando que \bar{v}_A^C é um escalar e portanto seus elementos de matriz são diagonais, podemos escrever para m_{l_1} e m_{l_2} fixos:

$$\langle n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} \rangle = \sum_{\lambda} (l_1 m_{l_1} l_2 m_{l_2} | \lambda u)^2 \times$$

(u fixo)

$$\times \langle n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda u | \bar{v}_A^C | n_2 l_2, n_1 l_1, \lambda u \rangle$$

Utilizando os parênteses de transformação de Moshinsky para funções de onda de oscilador harmônico esta relação pode ser escrita como:

$$\langle n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} | \bar{v}_A^C | n_2 l_2 m_{l_2}, n_1 l_1 m_{l_1} \rangle =$$

$$= \sum_{n_1 l_1 \lambda} (l_1 m_{l_1} l_2 m_{l_2} | \lambda u)^2 \langle n l, n l, \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \rangle^2 \langle n l | \bar{v}_A^C | n l \rangle$$

A energia de separação de uma partícula em um estado caracterizado pelos números quânticos $n_1 l_1 j_1$ e sujeita a uma interação central será, pois, dada pela expressão:

$$\begin{aligned}
 -E_{n_1 l_1 j_1}^C &= t_{n_1 l_1 j_1} + \sum_{n_2 l_2} \frac{\bar{N}_{n_2 l_2}}{2l_2 + 1} \times \\
 &\times \sum_{n l n l \lambda} \langle n l, n l, \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \rangle^2 \sum_{\substack{(n_1 l_1 j_1 \text{ fixos}) \\ M, m_S, m_{l_1}}} \sum_{j_2, J, L, S} \times \\
 &\times (2j_2 + 1) (2L + 1) (2S + 1) \begin{Bmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix}^2 \times \\
 &\times (LM - m_S m_S | JM)^2 (l_1 m_{l_1} l_2 M - m_S - m_{l_1} | LM - m_S)^2 \times \\
 &\times (l_1 m_{l_1} l_2 M - m_S - m_{l_1} | \lambda M - m_S)^2 \langle n l | \frac{1}{8} \bar{v}_A^C | n l \rangle \quad \text{(III.31)}
 \end{aligned}$$

As expressões (III.31) e (III.16) que são válidas para camadas fechadas, são igualmente válidas para camadas não fechadas desde que se suponha que cada nucleon em uma camada parcialmente preenchida contribua à energia de separação do mesmo modo que contribuiria se estivesse em uma camada completamente preenchida.

Observemos que \bar{v}_A^C , que ocorre na relação (III.31), depende de m_S . A expressão (III.31) está relacionada com a expressão (III.16) obtida por Brink e Sherman através da relação:

$$(-\bar{E}_{\rho_1}^C) = \sum_{j_1} \frac{(2j_1 + 1)}{2[\rho_1]} (-E_{n_1 l_1 j_1}^C)$$

como se mostra no Apêndice C.

III.3 ENERGIA DE SEPARAÇÃO PARA UM POTENCIAL SPIN-ÓRBITA

Desejamos calcular a contribuição à energia de separação devida a um potencial do tipo spin-órbita. Como vimos na seção III.2 devemos então calcular a expressão (III.29) sendo $v_A = v_A^{S.O.}$.

Antes de apresentar tal cálculo, examinemos a expressão do potencial spin-órbita. Podemos escrever (40) (41):

$$v_A^{S.O.} = \gamma_A \underline{S} \cdot \underline{L}$$

onde

$$\underline{S} = \underline{s}_1 + \underline{s}_2 = \frac{1}{2} (\underline{\sigma}_1 + \underline{\sigma}_2)$$

$$\underline{L} = \underline{l}_1 - \underline{l}_2$$

e:

$$\gamma_A = v(1 - P_M P_\sigma P_\tau)$$

onde:

$$v = V_t \left(\frac{1+P_\sigma}{2} \right)$$

Não é necessário, como no caso das forças centrais, fazer $v = V_s \left(\frac{1-P_\sigma}{2} \right) + V_t \left(\frac{1+P_\sigma}{2} \right)$, pois a força de acoplamento spin-órbita não produz efeitos no estado singleto ($S=0$), mas só no estado triplet ($S=1$), e portanto os elementos de matriz de $V_s \left(\frac{1-P_\sigma}{2} \right)$ seriam nulos.

Podemos portanto escrever $v_A^{S.O.}$ como:

$$v_A^{S.O.} = \frac{V_t}{2} (1 + P_\sigma - P_M P_\sigma P_\tau - P_M P_\tau) \underline{S} \cdot \underline{L} \quad (III.32)$$

Usando as relações (III.28), (III.32),
(B-1) e (B-2):

$$H_{n_2 l_2 j_2}^{s.o.} = \frac{1}{4} \sum_{m_1 m_2} \sum_{JJ'} \sum_{LS} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) \times$$

(M fixo) L'S'

$$\times (j_1 m_1 j_2 m_2 | J'M) [(2L'+1)(2L+1)(2S'+1)(2S+1)]^{1/2} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} L' & l_1 & l_2 \\ S' & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J' & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \sum_{\tau_1 \tau_2} \langle n_1 \tau_1, n_2 \tau_2, (l_1 l_2) L', (s_1 s_2) S', J'M | \times$$

$$\times \frac{V_t}{2} (1 + P_{\sigma}^{-P_M} P_{\sigma} P_{\tau}^{-P_M} P_{\tau}) S_{-} \cdot l | n_1 \tau_1, n_2 \tau_2, (l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S, JM \rangle$$

(III.33)

Efetuemos a soma sobre τ_1 e τ_2 , a que chamaremos de G:

$$G = \langle (n_1 l_1, n_2 l_2) L', (s_1 s_2) S', J'M | V_t (2 - P_M) S_{-} \cdot l | (n_1 l_1, n_2 l_2) L, (s_1 s_2) S, JM \rangle +$$

$$+ \langle (n_1 l_1, n_2 l_2) L', (s_1 s_2) S', J'M | V_t (2 - P_M) P_{\sigma} S_{-} \cdot l | (n_1 l_1, n_2 l_2) L, (s_1 s_2) S, JM \rangle$$

Sabemos que o elemento de matriz do produto escalar de dois operadores tensoriais que atuam em espaços diferentes, e portanto comutam, pode ser expresso como ⁴²⁾:

$$\begin{aligned} &\langle \gamma' j_1' j_2' J' M' | \underline{T}(k) \cdot \underline{U}(k) | \gamma j_1 j_2 J M \rangle = \\ &= (-1)^{j_1' + j_2' + J} \delta_{J' J} \delta_{M' M} \begin{Bmatrix} J & j_2' & j_1' \\ k & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \times \\ &\times \sum_{\gamma''} \langle \gamma' j_1' | | \underline{T}(k) | | \gamma'' j_1 \rangle \langle \gamma'' j_2' | | \underline{U}(k) | | \gamma j_2 \rangle \end{aligned}$$

onde os operadores $\underline{T}(k)$ e $\underline{U}(k)$ atuam em espaços em que os números quânticos são indexados com os números 1 e 2 respectivamente.

Usando esta relação podemos escrever:

$$\begin{aligned} G &= (-1)^{L+S'+J} \delta_{JJ'} \begin{Bmatrix} J & S' & L' \\ 1 & L & S \end{Bmatrix} \times \\ &\times \langle n_1 l_1, n_2 l_2, L' | | V_c^{(2-p_M)} | | n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle \langle S' | | (1+p_\sigma) S | | S \rangle \end{aligned} \quad \text{(III.34)}$$

E:

$$\begin{aligned} H_{n_2 l_2 j_2}^{S.O.} &= \frac{1}{4} \sum_{m_1 m_2} \sum_J \sum_{LS} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM)^2 \times \\ &\quad (M \text{ fixo}) \quad L'S' \\ &\times [(2L'+1)(2L+1)(2S'+1)(2S+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L' & l_1 & l_2 \\ S' & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J' & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \times \\ &\times \begin{Bmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} (-1)^{L+S'+J} \begin{Bmatrix} J & S' & L' \\ 1 & L & S \end{Bmatrix} \times \\ &\times \langle n_1 l_1, n_2 l_2, L' | | V_c^{(2-p_M)} | | n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle \langle s_1, s_2; S' | | (1+p_\sigma) S | | s_1, s_2; S \rangle \end{aligned} \quad \text{(III.35)}$$

Como:

$$\sum_{m_1 m_2} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM)^2 = \sum_{M, m_1} (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM)^2 = 2J + 1$$

a relação (III.35) pode ser escrita como:

$$H_{n_2 l_2 j_2}^{s.o.} = \frac{1}{4} \sum_{\substack{JLS \\ L'S'}} (2J+1) (-1)^{L+S'+J} [(2L'+1)(2L+1)(2S'+1)(2S+1)]^{1/2}$$

$$\times \begin{Bmatrix} L' & l_1 & l_2 \\ S' & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J' & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & S' & L' \\ 1 & L & S \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \langle n_1 l_1, n_2 l_2, L' || V_t(2-P_M) || n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle \times$$

$$\times \langle s_1 s_2; S' || (1+P_\sigma) \underline{S} || s_1, s_2; S \rangle$$

Como $P_\sigma |S\rangle = |S\rangle$,

$$\langle s_1, s_2; S' || (1+P_\sigma) \underline{S} || s_1, s_2; S \rangle = 2 \langle S' || \underline{S} || S \rangle \quad (III.37)$$

Mas, usando o teorema de Wigner-Eckart⁴²⁾,

$$\langle S' m'_S | S_z (k=1, q=0) | S m_S \rangle = (-1)^{1-S+S'} \frac{(10 S m_S | S' m'_S)}{(2S'+1)^{1/2}} \langle S' || \underline{S} || S \rangle$$

(III.38)

com

$$\langle S' m'_S | S_z (k=1, q=0) | S m_S \rangle = m_S \langle S' m'_S | S m_S \rangle = m_S \delta_{SS'} \delta_{m_S m'_S}$$

Logo:

$$m_S = - \frac{(10s m_S | s m_S)}{(2s+1)^{1/2}} \langle s' || \underline{s} || s \rangle \delta_{ss'}$$

Observemos que como $s_1 = \frac{1}{2}$ e $s_2 = \frac{1}{2}$, $S = 0$ ou 1 . O coeficiente de Clebsh-Gordon $(10s m_S | s m_S)$ é igual a zero se $S = 0$.

Para $S \neq 0$:

$$(10s m_S | s m_S) = - \frac{m_S}{\sqrt{S(S+1)}}$$

e portanto:

$$\langle s' || \underline{s} || s \rangle = \sqrt{S(S+1)(2S+1)} \delta_{ss'} \delta_{s1}$$

Substituindo na relação (III.37) obtêm-se:

$$\langle s_1, s_2; s' || (1+p_\sigma) \underline{s} || s_1, s_2; s \rangle = 2 \sqrt{S(S+1)(2S+1)} \delta_{s's} \delta_{s1}$$

(III.39)

Então:

$$H_{n_2 l_2 j_2}^{s.o.} = \frac{1}{2} \sum_{JLL'S} (2J+1) (-1)^{L+S+J} [(2L'+1)(2L+1)]^{1/2} \times$$

$$\times (2S+1) [S(S+1)(2S+1)]^{1/2} \delta_{s1} \begin{Bmatrix} L' & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \begin{Bmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & S & L' \\ 1 & L & S \end{Bmatrix} \times$$

$$\times \langle n_1 l_1, n_2 l_2, L' || V_t^{(2-p_M)} || n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle$$

(III.40)

Para calcular o elemento reduzido da matriz que ocorre na equação (III.40), usamos os parênteses de transformação de Moshinsky para funções de onda de oscilador harmônico. Sabemos que⁴³⁾:

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda | |V(x)| | n_1' l_1', n_2' l_2', \lambda' \rangle = \\ & = \sum_{n l n \lambda} \langle n l, n \lambda, \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \rangle \langle n' l, n \lambda, \lambda' | n_1' l_1', n_2' l_2', \lambda' \rangle \quad \times \\ & \times \langle n l | |V(x)| | n' l \rangle [l(l+1)(2l+1)(2\lambda'+1)]^{1/2} \quad \times \\ & (-1)^{l+1-l-\lambda} W(l l \lambda \lambda'; l l) \end{aligned}$$

sendo:

$$n' - n = n_1' - n_1 + n_2' - n_2 + \frac{1}{2} (l_1' + l_2' - l_1 - l_2)$$

Para o elemento de matriz que desejamos calcular $n_1' = n_1$, $n_2' = n_2$, $l_1' = l_1$, $l_2' = l_2$, e portanto $n' = n$. Então:

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1, n_2 l_2, L' | |V_t(2-P_M)| | n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle = \\ & = \sum_{n l n \lambda} \langle n l, n \lambda, L | n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle \langle n l, n \lambda, L' | n_1 l_1, n_2 l_2, L' \rangle \quad \times \\ & \times \langle n l | |V_t(2-P_M)| | n l \rangle [l(l+1)(2L+1)(2L'+1)]^{1/2} \quad \times \\ & \times (-1)^{l+1-l-L} W(l l L L'; l l) \end{aligned}$$

Logo:

$$H_{n_2 l_2 j_2}^{s.o.} = \frac{3\sqrt{6}}{2} \sum_{n_1 l_1} \sum_{J L L'} (-1)^{L+J+L'+l+l} x$$

$$x (2J+1) (2L+1) (2L'+1) [l(l+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} L' & l_1 & l_2 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} x$$

$$x \begin{Bmatrix} L & l_1 & l_2 \\ 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} J & l & L' \\ 1 & L & 1 \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & l & 1 \\ L' & L & l \end{Bmatrix} x$$

$$\langle n_1 l_1, n_2 l_2, L | n_1 l_1, n_2 l_2, L \rangle \langle n_1 l_1, n_2 l_2, L' | n_1 l_1, n_2 l_2, L' \rangle x$$

$$x \langle n_1 l_1 | V_t (2 - P_M) | n_1 l_1 \rangle \quad (III.41)$$

e portanto a contribuição à energia de separação devida a um potencial spin-órbita é

$$F_{n_1 l_1 j_1}^{s.o.} = \sum_{n_2 l_2 j_2} \bar{N}_{n_2 l_2 j_2} H_{n_2 l_2 j_2}^{s.o.}$$

sendo $H_{n_2 l_2 j_2}^{s.o.}$ dado pela relação (III.41).

IV - APLICAÇÃO A NÚCLEOS DAS CAMADAS 1s, 1p E 2s-1d

As expressões para as energias de separação de nucleons dos estados $1s_{1/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$, $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$ e $1d_{3/2}$ foram obtidas explicitamente para núcleos até o ^{40}Ca usando-se como potencial uma soma de um potencial central e um potencial spin-órbita. Nestas expressões a parte central da energia de separação de uma partícula de um estado caracterizado pelos números quânticos $n_1 l_1 j_1$, foi tomada como uma média ponderada sobre todos os valores $-E_{n_1 l_1 j_1}^C$ da camada, dados pela equação (III.31), e tais que $2n+1 = \rho_1 = 2n_1 + l_1$. Estas expressões, relacionadas no apêndice D, são do tipo:

$$E_{\alpha}^{(Z,A)} = \sum_{\beta} B_{\alpha\beta}^{(Z,A)} P_{\beta} \quad (\text{IV.1})$$

onde α indica o estado, (Z,A) o núcleo do qual o nucleon está sendo separado, E a energia de separação, P_{β} ($\beta=2, \dots, n$) os parâmetros V_k ($k=0, 1, 2, 3, 4$), v_{ij} ($i=0, 1; j=1, 2, 3, 4$), $P_1 = 1$ e B os coeficientes dos parâmetros, com $B_{\alpha 1}^{(Z,A)} = t_{\alpha}^{(Z,A)}$. Cinco dos parâmetros provêm do potencial central (V_0, V_1, V_2, V_3, V_4) e seis da parte spin-órbita ($v_{01}, v_{02}, v_{03}, v_{04}, v_{11}, v_{12}$). Os coeficientes dos parâmetros, $B_{\alpha\beta}^{(Z,A)}$, para α, β e (Z,A) fixos dependem apenas do número de partículas por estado e camada (ver apêndice D).

Nosso objetivo é estudar a possibilidade de obter um conjunto de valores para os parâmetros de modo a que as energias de separação obtidas reproduzam satisfatoriamente os valores experimentais. Os dados experimentais utilizados referem-se aos estados em consideração para núcleos desde o ^4He até o ^{40}Ca e perfazem um total de 36 dados (relacionados no apêndice E), obtidos ou de experiências de espalhamento $(p, 2p)$ ³⁾ ou de diferenças de massas⁴⁴⁾.

O estudo dos valores dos parâmetros foi feito usando o ajustamento de mínimos quadrados para um polinômio⁴⁵⁾. Neste método numérico minimiza-se o desvio médio quadrático

$$\chi_{\alpha}^2 = \sum_{(Z,A)} \frac{1}{[\sigma_{\alpha}(Z,A)]^2} (E_{\alpha}^{(Z,A)} - E_{\alpha}^{(Z,A)})^2$$

onde $\bar{E}_\alpha(Z,A)$ é a energia de separação experimental correspondente a $E_\alpha(Z,A)$ e $\sigma_\alpha(Z,A)$, o erro na medida de $\bar{E}_\alpha(Z,A)$. Os erros existentes nos dados experimentais, quando obtidos de experiências $(p,2p)$, são uma mistura de erro experimental e de largura de pico, em proporções diferentes de dado para dado. Os dados obtidos a partir de diferenças de massa são exatos. As diferenças entre os erros não foram levadas em consideração, tomando-se os $\sigma_\alpha(Z,A)$ iguais a uma constante.

O ajustamento de mínimos quadrados foi realizado com um programa para computador em linguagem FORTRAN. Neste programa são dados de entrada: o número total de estados nucleares usados, o número de parâmetros a ajustar, as energias de separação experimentais dos estados em consideração e os coeficientes dos parâmetros. Obtém-se como resultados: o desvio médio quadrático, os valores dos parâmetros, os erros nos parâmetros e as energias de separação calculadas com os parâmetros obtidos.

Foram efetuadas diversas tentativas de ajustamento dos parâmetros, utilizando diferentes grupos de dados experimentais. Observe-se que estamos supondo que o nucleon para o qual se está calculando a energia de separação foi separado de um núcleo que obedece ao modelo de camadas em sua forma mais simples.

1) Inicialmente utilizamos dados de energias de separação de partículas do estado $1s_{1/2}$. Como se pode ver das expressões no apêndice D, estas energias dependem apenas de cinco parâmetros: V_0, V_1, V_2, v_{01} e v_{02} . Foram realizados ajustamentos para: a) todos os dados experimentais para estados $1s_{1/2}$ relacionados no apêndice E; b) dados de estados $1s_{1/2}$ de núcleos até o ^{16}O . Obtém-se em ambos os casos $\chi^2 = 2,25$ e erros pequenos na estimativa dos parâmetros V_0 e V_1 . O parâmetro V_2 , que ocorre apenas no caso a), apresenta erro razoável em sua determinação. Os parâmetros v_{01} e v_{02} apresentam erros grandes, tornando os valores obtidos para os referidos parâmetros não significativos. O parâmetro v_{02} não ocorre no caso b). As energias obtidas concordam bem com os valores experimentais, como mostra a figura 1. Na tabela V são apresentados os resultados do caso a).

Tabela V - Resultados do ajustamento de mínimos quadrados usando os 10 dados experimentais para o estado $1s_{1/2}$ relacionados no apêndice E ($\chi^2 = 2,25$)

Parâmetros	Valores dos parâmetros (MeV)	Erros (MeV)
v_0	-12,58	0,36
v_1	4,99	0,40
v_2	-4,74	1,26
v_{01}	0,46	0,88
v_{02}	0,17	3,77

Energias calculadas:

^4He	^6Li	^7Li	^{10}B	^{11}B	^{12}C	^{14}N	^{16}O	^{28}Si	^{40}Ca
18,38	23,83	26,17	32,46	34,40	36,29	40,56	44,71	47,00	51,00

Observe-se que os desvios dos valores das energias calculadas para as experimentais são de no máximo 1,6 MeV (para o ^{11}B), sendo zero para o ^{28}Si e ^{40}Ca .

ii) Realizamos, ademais, ajustamentos para as energias de separação dos estados da camada $1p$ utilizando os dados experimentais relacionados no apêndice E. Os ajustamentos tentados, tanto com todos os dados, tanto excluindo alguns, forneceram valores de χ^2 muito grandes, e consequente-

mente erros nos parâmetros também muito grandes e valores de energia sem significado. O ajustamento obtido com menores erros foi aquele em que excluimos os estados $lp_{3/2}$ dos núcleos ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$ e ${}^{11}\text{B}$, obtendo $\chi^2 = 51,03$. Ademais, os valores obtidos para um mesmo parâmetro em diferentes ajustamentos, usando energias de separação dos estados da camada lp , varia muito de ajustamento para ajustamento, confirmando que tais resultados não podem ser levados em consideração. Análises utilizando apenas os dados de energias de separação de estados $lp_{3/2}$ mostraram-se ainda mais insatisfatórias. Com as energias de estados $lp_{1/2}$ apenas, não é possível trabalhar, pois os dados existentes são em número insuficiente.

iii) Analisamos a seguir a separação entre estados $lp_{3/2}$ e $lp_{1/2}$ que é, neste modelo, devida apenas à força spin-órbita. Utilizando os dados dos núcleos ${}^{14}\text{N}$ e ${}^{16}\text{O}$ obtém-se ajustamento ótimo, com $v_{01} = -16,87$ MeV e $v_{02} = 35,26$ MeV. O erro médio quadrático é nulo e as energias obtidas são exatas. Se utilizarmos os cinco dados disponíveis obtém-se $\chi^2 = 1,999$, erro pequeno no parâmetro v_{01} , erro apreciável nos parâmetros v_{02} e v_{11} e erro muito grande em v_{03} . Este resultado está descrito na tabela VI.

Tabela VI: Resultados do ajustamento de mínimos quadrados usando os 5 dados experimentais para as diferenças de energia entre os estados $lp_{3/2}$ e $lp_{1/2}$ dos núcleos relacionados no apêndice E ($\chi^2 = 1,999$).

Parâmetros	Valores dos parâmetros (MeV)	Erros (MeV)
v_{01}	-15,26	3,94
v_{02}	31,04	9,55
v_{03}	-1,59	1,03
v_{11}	-27,62	7,19

Diferenças de energia calculadas:

^{14}N	^{16}O	^{19}F	^{28}Si	^{40}Ca
12,80	7,43	6,89	5,27	6,45

Observa-se que os valores dos parâmetros v_{01} e v_{02} obtidos neste caso, apesar dos pequenos erros, diferem totalmente dos valores obtidos usando os dados experimentais para o estado $1s_{1/2}$ (tabela V). Quanto aos valores calculados das diferenças de energia há, em geral, uma boa concordância com os valores experimentais, sendo o desvio para ^{14}N de 0,05 MeV, para o ^{16}O e para o ^{40}Ca de aproximadamente 0,5 MeV, para o ^{28}Si de 0,27 MeV e para ^{19}F de 1,11 MeV.

Foram realizados outros ajustamentos excluindo algum dos núcleos dos dados de entrada, observando-se que a exclusão quer do ^{28}Si quer do ^{19}F não afeta sensivelmente os valores de v_{01} e v_{02} embora afete os de v_{03} e v_{11} e que estes ajustamentos tem erro nulo, assim como o realizado com o ^{14}N e o ^{16}O . Estes resultados estão relacionados na tabela VII.

Tabela VII - Resultados do ajustamento de mínimos quadrados usando os dados experimentais para as diferenças de energia entre os estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$, relacionados no apêndice E, excluindo:
a) ^{28}Si ; b) $^{19}\text{F}(\chi^2=0)$.

Parâmetros	Valores dos parâmetros no caso a) (MeV)	Valores dos parâmetros no caso b) (MeV)
v_{01}	-16,86	-16,86
v_{02}	35,26	35,26
v_{03}	- 3,32	- 2,10
v_{11}	-19,57	-30,68

Ao excluir o ^{40}Ca o ajustamento é ruim, apenas os valores de v_{01} e v_{02} não sofrendo grandes alterações em relação ao ajustamento das diferenças $E_{1p_{3/2}} - E_{1p_{1/2}}$ com todos os dados.

iv) Foram realizadas tentativas de ajustamento utilizando os dados contidos no apêndice E para estados da camada 2s-1d. Os resultados obtidos são insatisfatórios, pois os valores de energia calculados diferem muito dos experimentais e os erros nos parâmetros são muito grandes.

v) Utilizamos a seguir os dados experimentais do apêndice E para os estados das camadas 1s e 1p de núcleos até ^{16}O . Com todos os dados o ajustamento forneceu $\chi^2=55,06$, pequeno erro apenas no parâmetro V_0 ($V_0 = -10,26$ MeV) e valores de energias ruins, especialmente os dos estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e ^7Li . Excluindo estes estados o valor de χ^2 baixa sensivelmente ($\chi^2=6,66$) fornecendo os parâmetros V_0 e V_1 com erro pequeno e tornando a concordância das energias calculadas com as experimentais melhor. Estes resultados encontram-se na tabela VIII e na figura 2. Foram excluídos do conjunto total de dados das camadas 1s e 1p outros estados, principalmente os núcleos leves, mas não se obteve um ajustamento melhor.

Tabela VIII - Resultado do ajustamento de mínimos quadrados usando os 17 dados experimentais para as energias de separação dos estados das camadas 1s e 1p para núcleos até ^{16}O , relacionados no apêndice E, excluídos os estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e do ^7Li ($\chi^2=6,66$)

Parâmetros	Valores dos parâmetros (MeV)	Erros (MeV)
V_0	-12,49	0,63
V_1	4,76	0,69
V_2	- 6,68	1,13
v_{01}	0,94	1,44
v_{02}	-10,68	3,63

Energias calculadas:

 $1s_{1/2}$

${}^4\text{He}$	${}^6\text{Li}$	${}^7\text{Li}$	${}^{10}\text{B}$	${}^{11}\text{B}$	${}^{12}\text{C}$	${}^{14}\text{N}$	${}^{16}\text{O}$
18,09	23,55	25,91	32,23	34,18	36,08	40,99	45,78

 $1p_{3/2}$ $1p_{1/2}$

${}^{10}\text{B}$	${}^{11}\text{B}$	${}^{12}\text{C}$	${}^{14}\text{N}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{14}\text{N}$	${}^{16}\text{O}$
4,66	9,14	13,54	19,35	24,97	7,89	10,73

Comparando os valores para os parâmetros obtidos neste caso com os obtidos usando os dados experimentais para a camada $1s_{1/2}$ (tabela V) observa-se que os valores de V_0 e V_1 são aproximadamente os mesmos, os valores de V_2 tem uma diferença de aproximadamente 2 MeV, os valores de v_{01} diferem de 0,5 MeV (mas ambos tem um erro muito grande) e os valores de v_{02} são totalmente distintos (0,17 e -10,68 MeV). Uma comparação com os valores dos parâmetros v_{01} e v_{02} obtidos usando as diferenças de energia entre os estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ (tabelas VI e VII) mostra que eles diferem completamente.

Os valores calculados de energias apresentam uma diferença pequena dos valores experimentais (até 0,5 MeV) apenas para as energias dos estados $1s_{1/2}$ do ${}^7\text{Li}$ e do ${}^{12}\text{C}$ e $1p_{1/2}$ do ${}^{14}\text{N}$. Para os outros estados esta diferença oscila de 0,8 a 2,5 MeV, com exceção da energia do estado $1p_{3/2}$ do ${}^{16}\text{O}$ que difere de aproximadamente 6 MeV do valor experimental. Conseqüentemente, o desdobramento de energia dos estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ para o ${}^{16}\text{O}$ é da ordem de 14 MeV quando deveria ser da ordem de 6 MeV.

vi) Realizamos então ajustamento com os dados experimentais dos estados das camadas $1s, 1p$ e $2s-1d$ para os núcleos a partir do ${}^{16}\text{O}$ (exclusivo) e até o ${}^{40}\text{Ca}$, relacionados no apêndice E. Com todos os dados o ajustamento resultou em $\chi^2 = 29,15$, com erros em todos os parâmetros excessivamente grandes e valores ruins das energias. Excluindo os estados

$1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ do ^{19}F obteve-se $\chi^2 = 5,88$ e erros razoáveis em todos os parâmetros, assim como energias satisfatórias (ver tabela IX e figura 3). Entretanto, os valores dos parâmetros não concordam com as estimativas dos outros grupos de ajustamentos. Por exemplo, o valor de V_0 que oscilava em torno de -12 a -13 MeV neste caso é de 41,46 MeV.

Tabela IX - Resultado do ajustamento de mínimos quadrados usando os 19 dados experimentais para as energias de separação de estados das camadas $1s$, $1p$ e $2s-1d$ para núcleos desde o ^{16}O (exclusive) até o ^{40}Ca , relacionados no apêndice E, excluídos os estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ do ^{19}F ($\chi^2 = 5,88$).

Parâmetros	Valores dos parâmetros (MeV)	Erros (MeV)
V_0	41,46	8,83
V_1	- 7,70	2,46
V_2	-85,51	14,24
V_{01}	-42,80	9,26
V_{02}	-63,08	19,43
V_3	70,16	12,01
V_{03}	81,56	14,02
V_{11}	-159,49	27,03
V_4	-38,06	7,08
V_{12}	-165,13	31,29
V_{04}	-61,28	10,36

Energias calculadas:

$1s_{1/2}$		$1p_{3/2}$		$1p_{1/2}$		$1d_{5/2}$		
^{28}Si	^{40}Ca	^{28}Si	^{40}Ca	^{28}Si	^{40}Ca	^{27}Al	^{28}Si	^{31}P
46,99	51,45	31,97	37,28	26,86	30,37	11,57	11,80	16,12

$1d_{5/2}$		$1d_{3/2}$		$2s_{1/2}$			
^{32}S	^{40}Ca	^{40}Ca	^{31}P	^{32}S	^{35}Cl	^{39}K	^{40}Ca
18,18	14,17	8,10	6,80	7,74	8,40	9,15	9,33

Observa-se que os valores calculados para as energias dos estados $1s_{1/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$ e $1d_{5/2}$ do ^{28}Si concordam muito bem com os valores experimentais (diferenças menores que 0,3 MeV). Para os outros estados as diferenças variam de 0,2 MeV (para o estado $1d_{3/2}$ do ^{40}Ca) até 1,3 MeV para o estado $1p_{1/2}$ do ^{40}Ca , com exceção das energias dos estados $1d_{5/2}$ do ^{27}Al e ^{32}S (com desvios, respectivamente, de 3,3 e 3,9 MeV) e das dos estados $2s_{1/2}$ do ^{35}Cl e ^{39}K (com desvios, respectivamente, de 2,1 e 2,8 MeV). Observa-se também que, para o ^{40}Ca , $E_{1p_{3/2}} - E_{1p_{1/2}} \approx 0,9$ MeV e $E_{1d_{5/2}} - E_{1d_{3/2}} \approx 6$ MeV.

vii) Foram também realizadas tentativas de ajuste intercadas. Usando os dados experimentais relacionados no apêndice E realizaram-se ajustamentos com estados das camadas: a) $1s$ e $1p$; b) $1p$ e $2s-1d$; c) $1s$ e $1s-1d$.

No caso a) o melhor resultado foi obtido excluindo os estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e ^7Li , resultando $\chi^2 = 11,14$, erro pequeno apenas nos parâmetros V_0, V_1 e V_2 ($V_0 = -13,65$ MeV, $V_1 = 6,25$ MeV, $V_2 = -8,29$ MeV) e energias razoáveis com exceção das dos estados $1p_{3/2}$ do ^{10}B e do ^{11}B que deram um desvio das experimentais de 4 MeV.

No caso b), utilizando todos os dados, obtém-se $\chi^2 = 8,15$, erro pequeno nos parâmetros V_1, V_2 e V_3 e valores

de energias com desvios em geral maiores ou da ordem de 1 MeV, ocorrendo os maiores desvios (da ordem de 5 MeV) para os estados $1p_{3/2}$ do ^{10}B e $1d_{5/2}$ do ^{27}Al . Excluindo os estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e ^7Li obtemos $\chi^2 = 6,24$, valores de energias com desvios dos valores experimentais de no máximo 3 MeV, mas nenhum dos parâmetros com erro pequeno.

No caso c) com todos os dados, temos $\chi^2 = 3,90$ e pequeno erro na determinação de V_0 e V_1 ($V_0 = -12,61$ MeV e $V_1 = 5,01$ MeV). As energias são razoáveis, sendo as piores as dos estados $2s_{1/2}$ do ^{39}K e do ^{35}Cl .

viii) Finalmente utilizamos todos os dados experimentais relacionados no apêndice E, obtendo $\chi^2 = 52,02$, apenas o parâmetro V_0 apresentando um pequeno erro em sua determinação. As energias obtidas não concordam em geral com as experimentais, sendo os piores resultados os das energias de separação dos estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e ^7Li . Realizamos então um ajustamento sem estes estados e observamos que χ^2 decresce para 19,18, o número de parâmetros com erro pequeno é maior, e as energias calculadas concordam melhor com as experimentais, embora não possam ser consideradas boas (ver tabela X e figura 4).

Tabela X - Resultado do ajustamento de mínimos quadrados usando todos os dados experimentais relacionados no apêndice E, exceto os dos estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e do ^7Li ($\chi^2 = 19,18$)

Parâmetros	Valores dos parâmetros (MeV)	Erros (MeV)
V_0	-13,54	0,77
V_1	6,03	0,62
V_2	- 7,59	1,31
V_{01}	2,35	2,30
V_{02}	-13,81	5,73
V_3	3,83	1,10
V_{03}	4,18	1,67

Cont. Tabela X

Parâmetros	Valores dos parâmetros (MeV)	Erros (MeV)
V_{11}	- 6,15	10,44
V_4	- 4,64	2,04
V_{12}	- 5,99	11,04
V_{04}	- 6,16	4,15

Energias calculadas:

 $1s_{1/2}$

^4He	^6Li	^7Li	^{10}B	^{11}B	^{12}C	^{14}N	^{16}O	^{28}Si
21,26	25,32	26,97	31,18	32,43	33,62	38,96	44,18	51,75

 $1s_{1/2}$ $1p_{3/2}$

^{40}Ca	^{10}B	^{11}B	^{12}C	^{14}N	^{16}O	^{19}F	^{28}Si
52,09	2,76	7,39	11,94	17,49	22,84	24,62	28,87

 $1s_{3/2}$ $1p_{1/2}$ $1d_{5/2}$

^{40}Ca	^{14}N	^{16}O	^{19}F	^{28}Si	^{40}Ca	^{27}Al	^{28}Si	^{31}P
40,59	6,85	8,85	13,72	27,26	31,32	6,05	8,03	12,75

 $1d_{5/2}$ $1d_{3/2}$ $2s_{1/2}$

^{32}S	^{40}Ca	^{40}Ca	^{31}P	^{32}S	^{35}Cl	^{39}K	^{40}Ca
14,45	23,26	1,96	4,00	5,35	8,40	12,36	13,34

Comparando os valores obtidos para os parâmetros V_0, V_1, V_2, v_{01} e v_{02} neste ajustamento com os valores obtidos no ajustamento em que se utilizaram os dados experimentais para o estado $1s_{1/2}$ (Tabela V) observa-se que os valores de V_0 e V_1 variam pouco de um ajustamento para outro, o valor de V_2 varia bastante e os valores de v_{01} e v_{02} são totalmente distintos nos dois ajustamentos. Comparando os valores de v_{01}, v_{02}, v_{03} e v_{11} obtidos neste ajustamento com os obtidos nos ajustamentos em que se consideram as diferenças de energia entre os estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ (Tabelas VI e VII), novamente se observa que não há relação alguma entre os valores dos dois casos. Entretanto, se compararmos os valores de V_0, V_1, V_2, v_{01} e v_{02} obtidos neste caso com os obtidos no ajustamento em que se consideraram as energias de separação dos estados das camadas $1s$ e $1p$ para núcleos até o ^{16}O (Tabela VIII) verifica-se que há uma concordância razoável entre os valores obtidos nos dois casos, embora parâmetros como v_{01} e v_{02} apresentem erro grande em sua determinação. Finalmente, se compararmos os parâmetros obtidos neste ajustamento com aqueles obtidos no ajustamento realizado com as energias de separação dos estados das camadas $1s, 1p$ e $2s-1d$ para núcleos desde o ^{16}O (exclusive) até o ^{40}Ca (Tabela IX) observa-se que os parâmetros são totalmente distintos, inclusive o parâmetro V_0 que em todos os ajustamentos a exceção daquele se manteve em um valor em torno de -13 MeV.

Quanto aos desvios dos valores calculados das energias em relação aos valores experimentais, observa-se que eles são em geral grandes (maiores do que 1 MeV e indo até 3 e 4 MeV) com exceção dos estados $1s_{1/2}$ do ^{10}B e do ^{16}O com desvios de 0,2 MeV, $1p_{1/2}$ do ^{14}N (0,70 MeV), do ^{19}F (0,5 MeV) e do ^{28}Si (0,26 MeV) e $1d_{5/2}$ do ^{32}S (0,1 MeV). Apresentam desvios excepcionalmente grandes os estados $1d_{5/2}$ do ^{40}Ca (8,26 MeV), $1d_{3/2}$ do ^{40}Ca (6,5 MeV) e $2s_{1/2}$ do ^{39}K (6 MeV). Observa-se também que $E_{1p_{3/2}} - E_{1p_{1/2}}$ para ^{16}O é da ordem de 4 MeV e para o ^{40}Ca da ordem de 9 MeV; finalmente $E_{1d_{5/2}} - E_{1d_{3/2}}$ para o ^{40}Ca é da ordem de 21 MeV, um resultado péssimo.

Realizamos inúmeros programas de ajustamento em que omitimos um ou mais dados experimentais, buscando sempre um menor χ^2 e melhor concordância entre energias experimentais e calculadas. O melhor resultado dá $\chi^2 = 13,73$ mas foi realizado sem os estados $1p_{3/2}$ dos ${}^6\text{Li}$, ${}^7\text{Li}$, ${}^{10}\text{B}$, ${}^{11}\text{B}$, ${}^{12}\text{C}$, o estado $1p_{1/2}$ do ${}^{14}\text{N}$, o estado $1d_{3/2}$ do ${}^{40}\text{Ca}$ e os estados $2s_{1/2}$ do ${}^{35}\text{Cl}$ e ${}^{39}\text{K}$. As energias obtidas neste ajustamento foram as melhores em conjunto mas ainda deixam a desejar em relação a uma boa concordância com os resultados experimentais. Os valores obtidos para os parâmetros são muito semelhantes aos que constam na Tabela X.

Neste conjunto de tentativas de ajustamento observou-se que, com exceção do ajustamento com $\chi^2 = 52,02$, todos os outros apontam os parâmetros V_0 , V_1 e V_2 com pequeno erro e com valores próximos aos do ajustamento apresentado na Tabela X. Os outros parâmetros apresentam erros grandes ou mesmo maiores do que o próprio valor do parâmetro, não sendo significativos os valores obtidos.

Do exposto concluímos que foi possível estimar razoavelmente apenas os valores dos parâmetros V_0 , V_1 e V_2 . Os valores dos parâmetros v_{01} e v_{02} ficam bem especificados quando trabalhamos com os desdobramentos de energia dos estados da camada $1p$ mas diferem totalmente dos valores obtidos em todas as outras tentativas de ajustamento.

Nos trabalhos realizados por Brink e Sherman³⁷⁾ foram utilizados parâmetros provenientes da parte central calculados por diversos autores usando interações nucleares específicas quais sejam as de Yalle¹¹⁾, de Hamada-Johnston¹⁰⁾, de Kallio-Koltveit⁴⁶⁾ e uma pseudo-interação central fenomenológica definida no espaço de momentum³⁸⁾. Observa-se que as quatro interações usadas apontam V_0 como tendo um valor de aproximadamente -8 MeV, V_1 variando de 0 a $0,71$ MeV, V_{10} com valores em torno de -7 MeV e V_{02} ou igual a 0 ou a $0,47$ MeV. Com estes valores a energia de separação de um neutron do estado $1s$ do ${}^{16}\text{O}$ é estimada como sendo próxima a 50 MeV e a do estado $1p$ próxima a 22 MeV. Observemos que o valor experimental da primeira é de 44 MeV e as dos estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ respectivamente 19 e $12,4$ MeV.

É conveniente observar que se realizarmos o ajustamento dos mínimos quadrados usando as energias de separação do estado ls calculadas para alguns núcleos por Brink e Sherman³⁷⁾, fixando V_1 em zero, obtemos $V_0 = -8,19$ MeV e $V_2 = 0,91$ MeV ($\chi^2 = 3,97$). Sem fixar V_1 , obtém-se $\chi^2 = 0,4$, $V_0 = -9,90$ MeV, $V_1 = 2,03$ MeV, $V_2 = -4,79$ MeV. Além disto se utilizarmos somente a parte central da expressão por nós obtida para a energia de separação, e que coincide com a de Brink e Sherman, e fizermos o ajustamento usando os dados do estado ls contidos no apêndice E, obteremos: $\chi^2 = 1,82$, $V_0 = -12,52$ MeV, $V_1 = 5,02$ MeV e $V_2 = -4,95$ MeV.

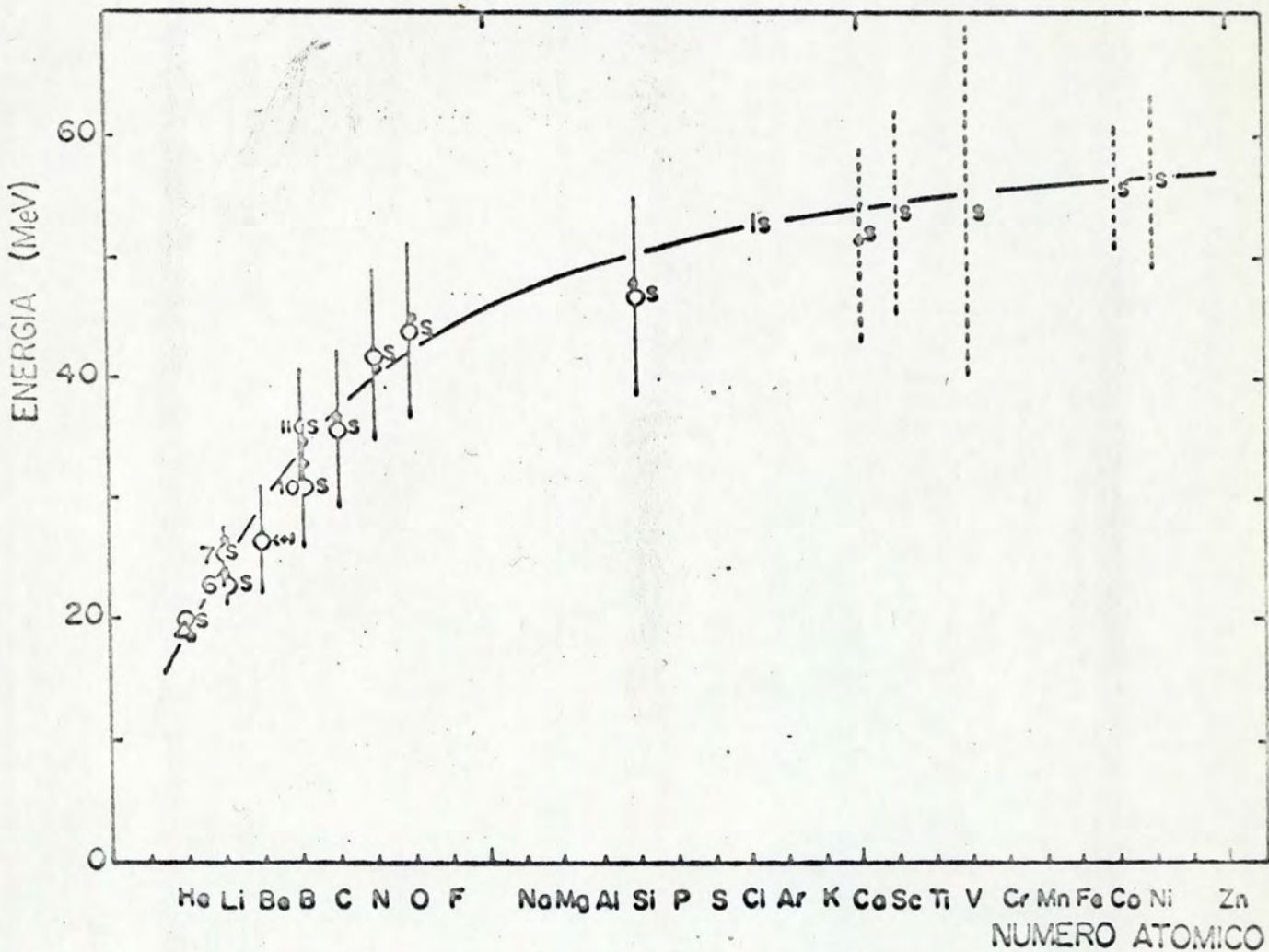


FIG. 1: Energias calculadas (pontos cheios) em ajustamento de mínimos quadrados usando os 10 dados experimentais para o estado $1s_{1/2}$ relacionados no apêndice E (tabela V), inseridas na Fig. 11 do trabalho de Jacob e Maris⁴⁾.

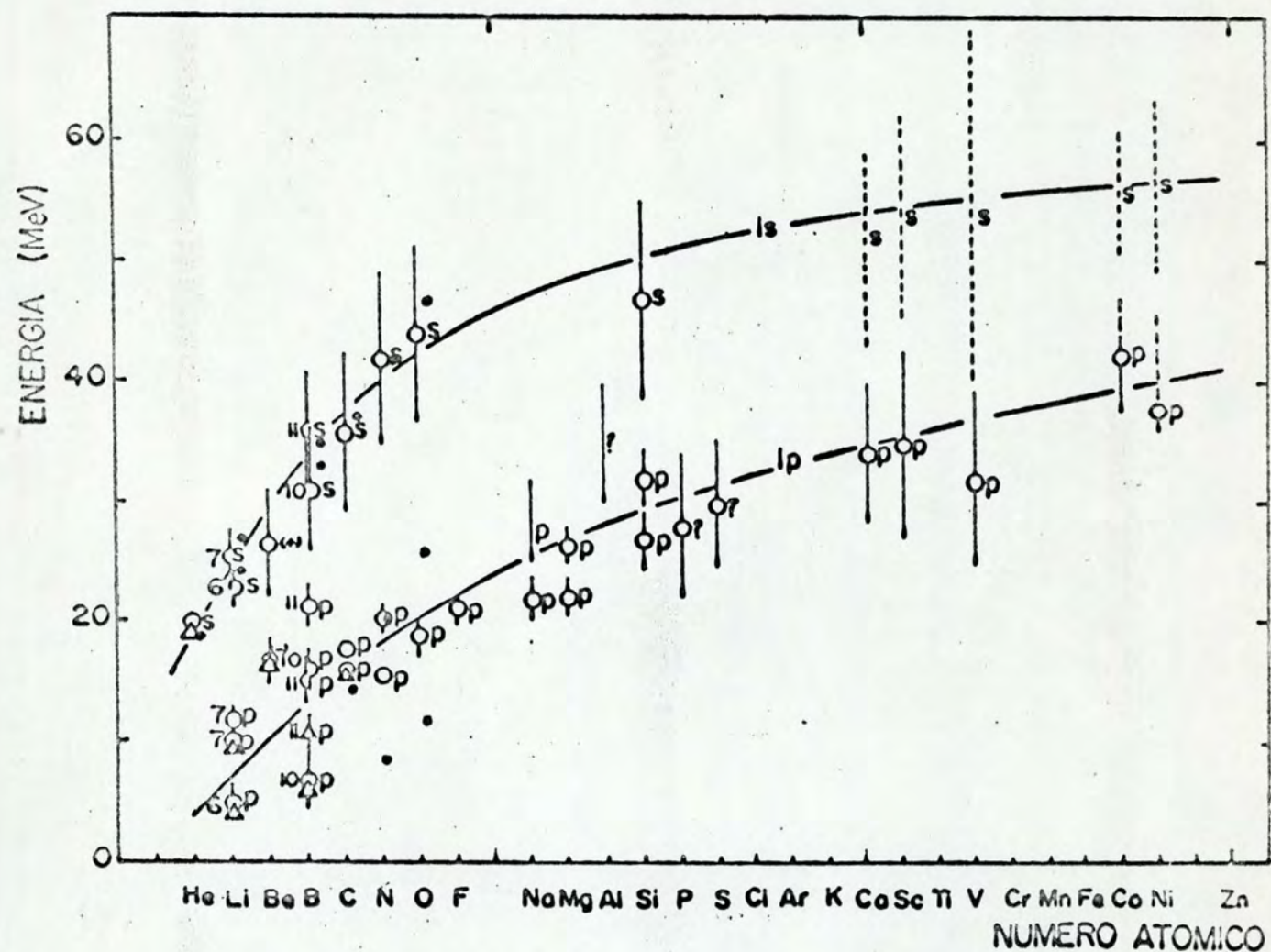


FIG. 2: Energias calculadas (pontos cheios) em ajustamento de mínimos quadrados usando os 17 dados experimentais para as energias de separação dos estados das camadas ls e lp para núcleos até o ^{16}O , relacionados no apêndice E, excluindo os estados $lp_{3/2}$ do ^6Li e ^7Li , inseridas na Fig. 11 do trabalho de Jacob e Maris⁴⁾.

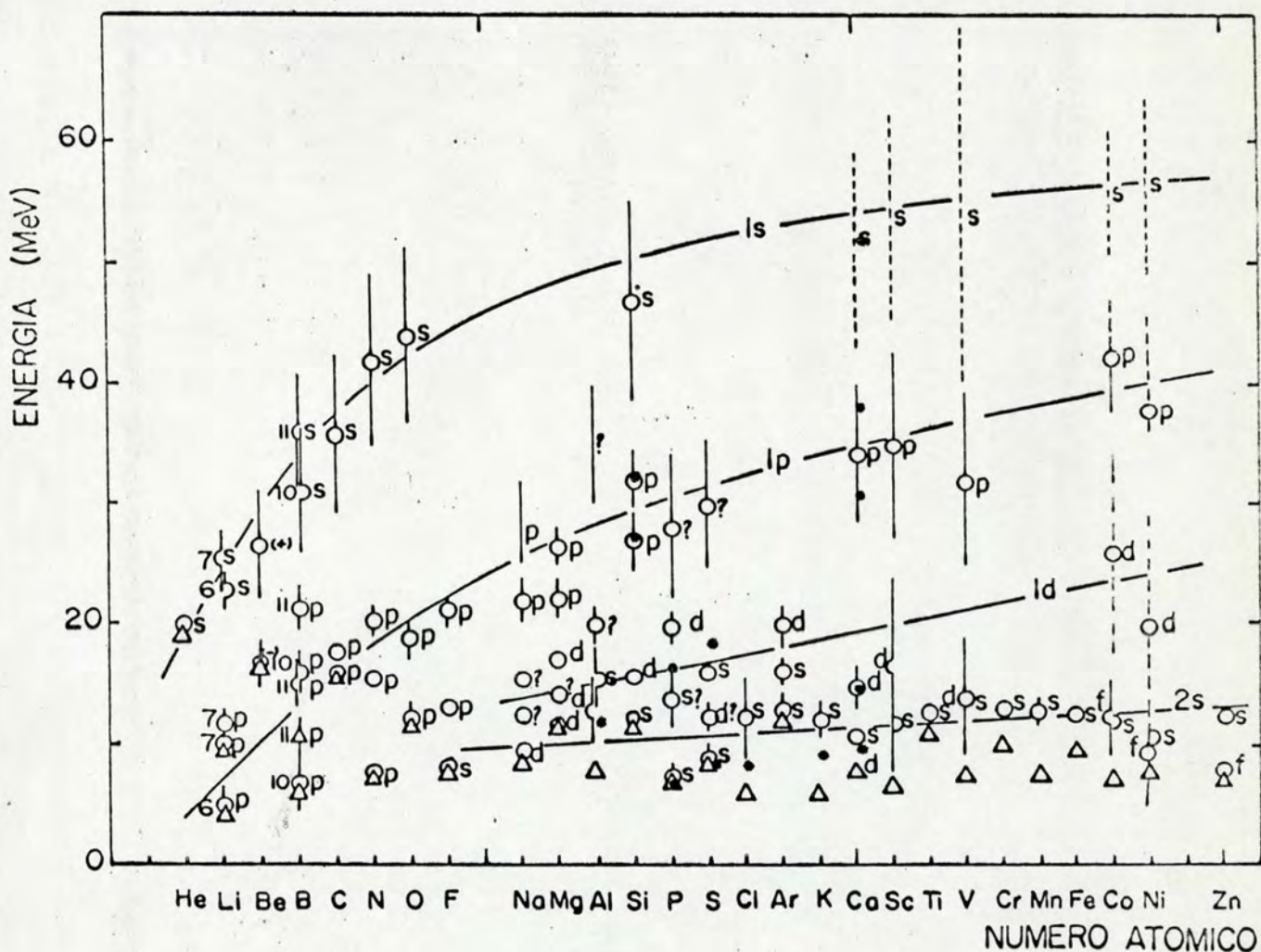


FIG. 3: Energias calculadas (pontos cheios) em ajustamento de mínimos quadrados usando os 19 dados experimentais para as energias de separação de estados das camadas $1s$, $1p$ e $2s-1d$ para núcleos desde o ^{16}O (exclusive) até o ^{40}Ca , relacionados no apêndice E, excluídos os estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ do ^{19}F , inseridas na Fig. 11 do trabalho de Jacob e Maris⁴⁾.

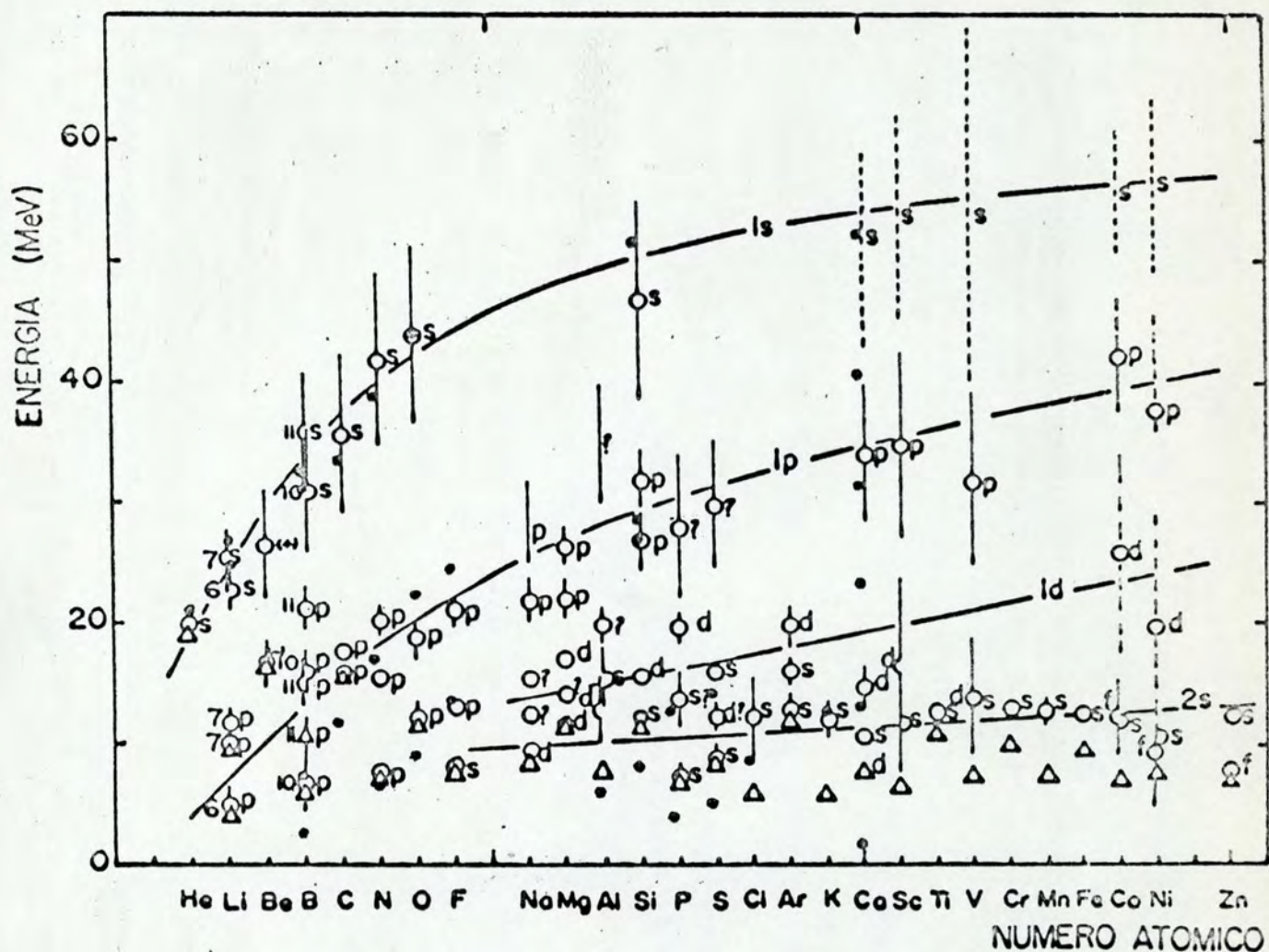


FIG. 4: Energias calculadas (pontos cheios) em ajustamento de mínimos quadrados, usando todos os dados experimentais relacionados no apêndice E, excluídos os dos estados $1p_{3/2}$ do ${}^6\text{Li}$ e ${}^7\text{Li}$, inseridas na Fig. 11 do trabalho de Jacob e Maris⁴⁾.

V - CONCLUSÕES

Neste trabalho estabelecemos a expressão, no modelo de camadas extremo, para a energia de separação de um nucleon do núcleo devido a um potencial soma de um potencial central e um potencial spin-órbita. Calculamos tanto a contribuição do potencial central como a do potencial spin-órbita usando acoplamento $j-j$. Usando uma interação geral central³⁸⁾, obtivemos a contribuição à energia de separação expressa na equação (III.31). Mostramos, ademais (apêndice C), como esta expressão se relaciona com a apresentada por Brink e Sherman³⁸⁾ que foi obtida usando acoplamento $l-s$. Usando a interação spin-órbita (equação (III.32)) obtivemos a contribuição correspondente à energia de separação (equação (III.41)), contribuição esta que não foi calculada por Brink e Sherman.

A partir das equações gerais apresentamos expressões analíticas para as energias de separação de nucleons dos estados $1s_{1/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$, $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$ e $1d_{3/2}$ válidas para núcleos até o ^{40}Ca (Apêndice D). Tais expressões são função do número de partículas em cada camada (na parte proveniente da interação central) e em cada estado (na parte proveniente da interação spin-órbita) e de parâmetros dependentes da interação.

Os parâmetros são de dois tipos: parâmetros provenientes da parte central da interação nucleon-nucleon dados como combinações de

$$V_{nl} = \langle nl | \bar{V} | nl \rangle = \begin{cases} \langle nl | \frac{1}{2} V_s + \frac{1}{2} V_t | nl \rangle & \text{para } l \text{ par} \\ \langle nl | \frac{1}{10} V_s + \frac{9}{10} V_t | nl \rangle & \text{para } l \text{ ímpar,} \end{cases}$$

e parâmetros provenientes da parte spin-órbita da interação nucleon-nucleon $V_{nl} = \langle nl | V_t | nl \rangle$. V_s e V_t são potenciais para os estados singlete e tripleto respectivamente, apropriados para os casos de interação central e interação spin-órbita.

É notório, do exposto no Capítulo IV que não foi possível obter um conjunto único de valores dos parâmetros que reproduzisse satisfatoriamente todos os valores experimentais de energias de separação considerados e que, nem todos os conjuntos obtidos fornecem bons resultados para todas as energias de um dado grupo (o melhor ajustamento, do ponto de vista das energias, foi o obtido usando os dados do estado $1s_{1/2}$ - Tabela V). Ademais, a determinação dos valores dos parâmetros apresentou erros consideráveis em quase todos os casos. A variação nos valores dos parâmetros de um ajustamento a outro permite estimar aproximadamente apenas os valores de três deles: V_0 , V_1 e V_2 . Vale ressaltar que realizando um ajustamento de mínimos quadrados usando as energias obtidas por Brink e Sherman³⁷⁾, foi possível reproduzir os valores estimados dos parâmetros que estes autores utilizaram para calcular tais energias, o que mostra que o método numérico utilizado é bom. Além disto, ao realizar as diversas tentativas de ajustamento dos parâmetros, descritas no Capítulo IV, observa-se que a ordem de grandeza do parâmetro V_0 concorda com a estimada por Brink e Sherman.

Observe-se que:

1) Alguns dos dados experimentais utilizados apresentam erro apreciável.

2) A expressão para a energia de separação foi obtida supondo que o nucleon para o qual se está calculando esta energia foi separado de um núcleo que obedecia ao modelo de camadas em sua forma mais simples. Alguns núcleos utilizados não obedecem caracteristicamente a este modelo.

3) O número de núcleos leves usados é grande e o comportamento de tais núcleos é caracteristicamente distinto do de núcleos médios e pesados.

A instabilidade dos valores dos parâmetros obtidos nas diversas tentativas de ajustamento sugere que se tente uma análise mais sofisticada do comportamento dos mesmos. Far-se-á posteriormente, já que está além do alcance do presente trabalho, uma estimativa dos valores efetivos destes parâmetros usando interações realísticas, que reproduzem os dados experimentais de espalhamento, como as de Reid¹²⁾, Hamada-Johnston¹⁰⁾ e Kallio-Kolltveit⁴⁶⁾. Os valores dos parâ-

metros obtidos em tais estimativas, além de servirem como ponto de referência, permitirão realizar um estudo das energias de separação para os diversos estados em consideração. Se for o caso, como a grande variação nos valores dos parâmetros parece estar sugerindo, que alguns dos parâmetros podem fornecer contribuições não significativas, tanto às energias como às diferenças de energia entre estados, a exclusão em primeira instância de tais parâmetros poderá permitir novas tentativas de ajustamento dos parâmetros restantes usando o método dos mínimos quadrados ora utilizado.

Por outro lado, como foi relatado no Capítulo IV, as diferenças de energia calculadas entre os estados $1p_{3/2}$ e $1p_{1/2}$ são razoáveis em sua concordância com os resultados esperados, mas a diferença obtida entre as energias dos estados $1d_{5/2}$ e $1d_{3/2}$ do ^{40}Ca é estimada em cerca de 20 MeV (em ajustamento usando todos os dados experimentais relacionados no apêndice E, exceto os estados $1p_{3/2}$ do ^6Li e ^7Li - Tabela X), enquanto experimentalmente ela é da ordem de 6 MeV. Tal discrepância em parte pode ser atribuída ao fato de termos tomado, para a contribuição à energia de separação da parte central, uma média ponderada sobre todos os valores $-E_{n\ell j}$ de uma camada, onde $-E_{n\ell j}$ é a contribuição à energia de separação de um nucleon do estado caracterizado pelos números quânticos $n\ell j$, devido a um potencial central. Esta aproximação, feita com o intuito de reduzir o número de parâmetros de 15 (9 da parte central e 6 spin-órbita) para 11, pode facilmente ser corrigida, já que a expressão (Cap. III) que dá a contribuição à energia de separação devido a um potencial central mais spin-órbita é dada diretamente em função dos 15 parâmetros mencionados.

Nos cálculos que nos propomos realizar a seguir, tal diferença será também considerada.

O trabalho presentemente apresentado permitiu evidenciar a instabilidade dos valores dos parâmetros que ocorrem na expressão da energia de separação calculada para um potencial soma de um potencial central com um potencial spin-órbita. Este fato não ocorre na situação mais simples e menos realística de uma interação apenas central, onde o

número de parâmetros a determinar é de apenas cinco, e onde, portanto, a relação entre o número de dados experimentais e o número de parâmetros a determinar é bastante maior.

Foi possível, com o trabalho ora apresentado, obter e apresentar expressões para as energias de separação de nucleons supondo uma interação soma de interações central e spin-órbita, expressões estas que podem servir como guia na comparação com resultados experimentais, sobretudo se desejarmos explicar os desdobramentos entre os estados $|n\frac{1}{2} = l + 1/2\rangle$ e $|n\frac{1}{2} = l - 1/2\rangle$. Uma análise mais sofisticada do problema resulta necessária, sendo a nossa próxima etapa de trabalho no projeto em questão.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. A.Bohr e B.R.Mottelson, "Nuclear Structure I, (Benjamin, 1969).
2. R.Hofstadter, Rev.Mod.Phys., 28 (1956) 214.
3. H.Tyrén, Th.A.J.Maris e P.Hillman, Nuovo Cimento 6 (1957) 1507.
H.Tyrén, S.Kullander, O.Sundberg, R.Ramachandran,
P.Isacsson e T.Berggren, Nucl.Phys., 79 (1966) 321.
B.Gottschalk, K.Strauch e K.H.Wang, Compt.Rend.Congr.
Intern.Phys.Nucl., vol.2 (C.N.R.S., Paris, 1964) p.324.
M.Arditi, H.Dobre, M.Riou, D.Royer e C.Ruhla, Nucl.Phys.,
A103 (1967) 319.
A.Bussiere, J.Mougey, Phan Xuan Ho, M.Priou e I.Sick,
Lettere Nuovo Cimento, 2 (1971) 1149.
C.Ruhla, M.Arditi, H.Dobre, J.C.Jacmart, M.Liu, R.A.Ricci,
M.Riou e J.C.Roynette, Nucl.Phys., A95 (1967) 526.
Para maiores referências sobre o assunto ver referência 4.
4. Th.A.J.Maris, Nucl.Phys., 9 (1958/59) 577.
G.Jacob e Th.A.J.Maris, Rev.Mod.Phys., 38 (1966) 121.
G.Jacob e Th.A.J.Maris, Rev.Mod.Phys., 45 (1973) 6.
5. A.L.Fetter e J.D.Walecka, "Quantum theory of many-particle systems" (McGraw-Hill, New York, 1971).
6. M.A.Preston, "Physics of the nucleus", (Addison-Wesley Publishing Company, 1962).
7. W.N.Hess, Rev.Mod.Phys., 30 (1958) 368.
8. R.Jastrow, Phys.Rev., 81 (1951) 165).
9. B.R.Barrett, Phys.Rev., 154 (1967) 955.
10. T.Hamada e I.D.Johnston, Nucl.Phys., 34 (1962) 382.
11. K.E.Lassila, M.H.Hull,Jr., H.M.Ruppel, F.A.McDonald e G.Breit, Phys.Rev., 126 (1962) 881.
12. R.V.Reid, Jr., Ann.Phys., (N.Y.) 50 (1968) 411.
13. V.E.Herscovitz, G.Jacob e Th.A.J.Maris, Nucl.Phys., A109 (1968) 478.
V.E.Herscovitz, Nucl.Phys., A161 (1971) 321.
14. U.Amaldi, Jr., Supp.Nuovo Cimento, 5 (1967) 1225.
15. A.M.Green, Nucl.Phys., 33 (1962) 218).
16. M.Bouten, "Hartree-Fock calculations for light nuclei".
Theory of nuclear structure, Trieste lectures, 1969, p.361.
17. W.H.Bassichis, M.R.Strayer, Annals of Physics, 66 (1971) 457.

18. J.Nemeth e D.Vautherin, *Phys.Lett.*, 32B (1970) 561.
19. S.J.Krieger, *Phys.Rev.C*, 1 (1970) 76.
20. J.Nemeth, G.Ripka, *Nucl.Phys.*, A194 (1972) 329.
21. D.Vautherin e D.M.Brink, *Phys.Rev.C*, 5 (1972) 626.
22. B.Rouben e G.Saunier, *Phys.Rev.C*, 5 (1972) 1223.
23. J.W.Ehlers e S.A.Moszkowski, *Phys.Rev.C*, 6 (1972) 217.
24. K.A.Brueckner e C.A.Levinson, *Phys.Rev.*, 97 (1955) 1344.
K.A.Brueckner, *Phys.Rev.*, 97 (1955) 1353.
K.A.Brueckner, C.A.Levinson e H.M.Mahmoud, *Phys.Rev.*, 95
(1954) 217.
K.A.Brueckner, *Phys.Rev.*, 96 (1954) 508.
25. K.M.Watson, *Phys.Rev.*, 89 (1953) 575.
N.C.Francis e K.M.Watson, *Phys.Rev.*, 92 (1953) 291.
26. L.C.Gomes, J.D.Walecka e V.F.Weisskopf., *Ann.Phys. (N.Y.)*
3 (1958) 241.
27. H.A.Bethe, *Phys.Rev.*, 103 (1956) 1353.
28. R.J.Eden, *Proc.Roy.Soc. (London)* A235 (1956) 408.
29. K.A.Brueckner e J.L.Gammel, *Phys.Rev.*, 109 (1958) 1023.
30. G.E.Brown, "Unified theory of nuclear models"
(North-Holland Publishing Company - Amsterdam, 1964).
31. K.A.Brueckner e W.Wada, *Phys.Rev.*, 103 (1956) 1008.
32. K.A.Brueckner, J.L.Gammel e H.Weitzner, *Phys.Rev.*, 110
(1958) 431.
33. K.A.Brueckner, *Phys.Rev.*, 110 (1958) 597.
34. H.S.Köhler e Y.C.Lin, *Nucl.Phys.*, A167 (1971) 305.
35. K.T.R.Davies e R.J.McCarthy, *Phys.Rev.C*, 4 (1971) 81.
36. K.T.R.Davies, R.J.McCarthy e P.U.Sauer, *Phys.Rev.C*,
6(1972) 1461.
37. D.M.Brink e N.Sherman, *Phys.Rev.Lett.*, 14 (1965) 393.
38. D.M.Brink e N.Sherman, *Nucl.Phys.*, A94 (1967) 385.
39. M.Moshinsky e T.A.Brody, *Tables of transformation brackets*
(monografias del Instituto de Física, Universidad de Mexico,
Mexico, D.F., 1960).
40. J.P.Elliott e A.M.Lane, *Phys.Rev.*, 96 (1954) 1160.
41. J.Hughes e K.J.Le Couteur, *Proc.Phys.Soc. A*, 63 (1950) 1219.
42. A.R.Edmonds, "Angular momentum in quantum mechanics"
(Princeton University Press, 1957).
43. M.Moshinsky, *Nucl.Phys.*, 13 (1959) 104.

44. J.H.E.Mattauch, W.Thiele e A.H.Wapstra, Nucl.Phys., 67 (1965) 1.
45. P.R.Bevington, "Data reduction and error analysis for the physical sciences", (McGraw-Hill Book Company, 1969).
46. A.Kallio e K.Kolltveit, Nucl.Phys., 53 (1964) 87.

APÊNDICE A

Consideremos a expressão $H - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha$ onde H é o Hamiltoniano do problema e η_α^+ , η_α operadores criação e destruição, respectivamente, para os estados de um único nucleon α .

$$H - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle [\eta_\lambda^+ \eta_\mu - \eta_\alpha^+ \eta_\lambda^+ \eta_\mu \eta_\alpha] + \\ + \frac{1}{4} \sum_{\kappa, \lambda, \mu, \nu} \langle \kappa \lambda | v_A | \mu \nu \rangle [\eta_\kappa^+ \eta_\lambda^+ \eta_\nu \eta_\mu - \eta_\alpha^+ \eta_\kappa^+ \eta_\lambda^+ \eta_\nu \eta_\mu \eta_\alpha]$$

Tendo em vista as relações de anticomutação para os operadores criação e destruição:

$$\{\eta_\gamma^+, \eta_\sigma^+\} = \{\eta_\gamma, \eta_\sigma\} = 0$$

$$\{\eta_\gamma^+, \eta_\sigma\} = \delta_{\gamma\sigma}$$

obtem-se:

$$H - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle [\delta_{\alpha\lambda} \delta_{\alpha\mu} - \delta_{\alpha\lambda} \eta_\mu \eta_\alpha^+ - \delta_{\alpha\mu} \eta_\alpha \eta_\lambda^+ + \eta_\alpha \eta_\lambda^+ \eta_\mu \eta_\alpha^+] + \\ + \frac{1}{4} \sum_{\kappa, \lambda, \mu, \nu} \langle \kappa \lambda | v_A | \mu \nu \rangle [\delta_{\alpha\lambda} \delta_{\alpha\nu} \eta_\kappa^+ \eta_\mu - \delta_{\alpha\lambda} \delta_{\alpha\mu} \eta_\kappa^+ \eta_\nu - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\alpha\kappa} \eta_\lambda^+ \eta_\mu + \\ + \delta_{\alpha\kappa} \delta_{\alpha\mu} \eta_\lambda^+ \eta_\nu + \delta_{\alpha\lambda} \eta_\kappa^+ \eta_\nu \eta_\mu \eta_\alpha^+ - \delta_{\alpha\kappa} \eta_\lambda^+ \eta_\nu \eta_\mu \eta_\alpha^+ + \delta_{\alpha\nu} \eta_\alpha \eta_\kappa^+ \eta_\lambda^+ \eta_\mu - \\ - \delta_{\alpha\mu} \eta_\alpha \eta_\kappa^+ \eta_\lambda^+ \eta_\nu + \eta_\alpha \eta_\kappa^+ \eta_\lambda^+ \eta_\nu \eta_\mu \eta_\alpha^+]]$$

Esta relação pode ser escrita também como:

$$H - \eta_{\alpha}^{\dagger} H \eta_{\alpha} = B + \eta_{\alpha} C + D \eta_{\alpha}^{\dagger} - \eta_{\alpha} H \eta_{\alpha}^{\dagger}$$

onde

$$B = \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle \delta_{\alpha\lambda} \delta_{\alpha\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\kappa, \lambda, \mu, \nu} \langle \kappa\lambda | v_A | \mu\nu \rangle \left[\delta_{\alpha\lambda} \delta_{\alpha\nu} \eta_{\kappa}^{\dagger} \eta_{\mu} - \delta_{\alpha\lambda} \delta_{\alpha\mu} \eta_{\kappa}^{\dagger} \eta_{\nu} - \delta_{\alpha\nu} \delta_{\alpha\kappa} \eta_{\lambda}^{\dagger} \eta_{\mu} + \delta_{\alpha\kappa} \delta_{\alpha\mu} \eta_{\lambda}^{\dagger} \eta_{\nu} \right]$$

$$C = - \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle \delta_{\alpha\mu} \eta_{\lambda}^{\dagger} + \frac{1}{4} \sum_{\kappa, \lambda, \mu, \nu} \langle \kappa\lambda | v_A | \mu\nu \rangle \times \left[\delta_{\alpha\nu} \eta_{\kappa}^{\dagger} \eta_{\lambda}^{\dagger} \eta_{\mu} - \delta_{\alpha\mu} \eta_{\kappa}^{\dagger} \eta_{\lambda}^{\dagger} \eta_{\nu} \right]$$

$$D = - \sum_{\lambda, \mu} \langle \lambda | t | \mu \rangle \delta_{\alpha\lambda} \eta_{\mu} + \frac{1}{4} \sum_{\kappa, \lambda, \mu, \nu} \langle \kappa\lambda | v_A | \mu\nu \rangle \times \left[\delta_{\alpha\lambda} \eta_{\kappa}^{\dagger} \eta_{\nu} \eta_{\mu} - \delta_{\alpha\kappa} \eta_{\lambda}^{\dagger} \eta_{\nu} \eta_{\mu} \right]$$

Observemos que B, C e D não contem η_{α} ou η_{α}^{\dagger} .

A expressão para B pode também ser escrita como

$$B = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + \frac{1}{4} \sum_{\kappa, \mu} \left[\langle \kappa\alpha | v_A | \mu\alpha \rangle - \langle \kappa\alpha | v_A | \alpha\mu \rangle - \langle \alpha\kappa | v_A | \mu\alpha \rangle + \langle \alpha\kappa | v_A | \alpha\mu \rangle \right] \eta_{\kappa}^{\dagger} \eta_{\mu}$$

Usando as relações de simetria

$$\langle \kappa \lambda | v_A | \mu \nu \rangle = - \langle \kappa \lambda | v_A | \nu \mu \rangle = - \langle \lambda \kappa | v_A | \mu \nu \rangle = \langle \lambda \kappa | v_A | \nu \mu \rangle$$

podemos escrever

$$B = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + W_\alpha$$

sendo

$$W_\alpha = \sum_{\kappa, \mu} \langle \kappa \alpha | v_A | \mu \alpha \rangle \eta_\kappa^+ \eta_\mu \quad (A-1)$$

Portanto

$$H - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha = \langle \alpha | t | \alpha \rangle + W_\alpha + \eta_\alpha^+ C + D \eta_\alpha^+ - \eta_\alpha^+ H \eta_\alpha \quad (A-2)$$

APÊNDICE B

Um estado na representação "desacoplada" pode ser expresso em uma base "acoplada" através da relação:

$$\begin{aligned}
 & |n_1 l_1 j_1 m_1 \tau_1, n_2 l_2 j_2 m_2 \tau_2 \rangle = \\
 & = \sum_J (j_1 m_1 j_2 m_2 | JM) |n_1 l_1 j_1 \tau_1, n_2 l_2 j_2 \tau_2, JM \rangle \quad (B-1) \\
 & (M \text{ fixo})
 \end{aligned}$$

Para mudar do acoplamento $j-j$ para o acoplamento $l-s$ utilizam-se as relações

$$\begin{aligned}
 & |(l_1 s_1) j_1, (l_2 s_2) j_2, JM \rangle \\
 & = \sum_{L,S} |(l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S, JM \rangle \times \\
 & \times \langle JM, (l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S | (l_1 s_1) j_1, (l_2 s_2) j_2, JM \rangle = \\
 & = \sum_{L,S} [(2L+1)(2S+1)(2j_1+1)(2j_2+1)]^{1/2} \times \\
 & \times \left\{ \begin{array}{ccc} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{array} \right\} |(l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S, JM \rangle \quad (B-2)
 \end{aligned}$$

Podemos escrever $|(l_1 l_2) L, (s_1 s_2) S, JM \rangle$ como:

$$\begin{aligned}
|(\ell_1 \ell_2)L, (s_1 s_2)S, JM\rangle &= \sum_{m_L, m_S} (L m_L S m_S | JM) |L m_L\rangle |S m_S\rangle = \\
&= \sum_{m_L m_S} (L m_L S m_S | JM) \times \\
&\times \left[\sum_{m_1 m_2} (\ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | L m_L) |\ell_1 m_1\rangle |\ell_2 m_2\rangle \right] \times \\
&\times \left[\sum_{\sigma_1 \sigma_2} (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S) |s_1 \sigma_1\rangle |s_2 \sigma_2\rangle \right] = \\
&= \sum_{m_L m_S} \sum_{m_1 m_2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} (L m_L S m_S | JM) (\ell_1 m_1 \ell_2 m_2 | L m_L) \times \\
&\times (s_1 \sigma_1 s_2 \sigma_2 | S m_S) |n_1 \ell_1 m_1 \sigma_1 \tau_1, n_2 \ell_2 m_2 \sigma_2 \tau_2\rangle
\end{aligned}
\tag{B-3}$$

APÊNDICE C

Consideremos a relação (III.31) que dá $-E_{n_1 l_1 j_1}^C$. O termo \bar{v}_A^C que ocorre nesta relação pode ser expresso como:

$$\bar{v}_A^C = \alpha \delta_{m_s, 0} + \beta \delta_{m_s, \pm 1}$$

onde

$$\alpha = V_s (2 + P_M) + V_t (2 - P_M)$$

$$\beta = 2V_t (2 - P_M)$$

Observemos também que \bar{v}_A , ocorrente na equação (III.16) pode ser expresso como:

$$\bar{v}_A = \frac{1}{8} (\alpha + \beta) \quad (C-1)$$

Consideremos:

$$\begin{aligned} & \sum_{j_1} \frac{(2j_1+1)}{2[\rho_1]} (-E_{n_1 l_1 j_1}^C) = \\ &= \sum_{n_2 l_2} \frac{\bar{N}_{n_2 l_2}}{(2l_2+1)[\rho_1]} \sum_{n l n l \lambda} \langle n l, n l, \lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \lambda \rangle^2 \times \\ & \times \sum_{m_s} \frac{1}{2} \sum_{M, m_l} \sum_{j_1, j_2, J, L, S} (2j_1+1) (2j_2+1) (2L+1) (2S+1) \times \end{aligned}$$

$$x \begin{pmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{pmatrix}^2 (LM-m_S \quad Sm_S | JM)^2 (l_1 m_{l_1} l_2 M-m_S-m_{l_1} | LM-m_S)^2 x$$

$$(l_1 m_{l_1} l_2 M-m_S-m_{l_1} | \lambda M-m_S)^2 \{ \langle n l | \frac{1}{8} \alpha | n l \rangle \delta_{m_S, 0} + \langle n l | \frac{1}{8} \beta | n l \rangle \delta_{m_S, \pm 1} \}$$

Chamemos

$$B = \frac{1}{2} \sum_{M m_{l_1}} \sum_{j_1 j_2} \sum_{JLS} (2j_1+1)(2j_2+1) x$$

$$x (2L+1)(2S+1) \begin{pmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{pmatrix}^2 (LM-m_S \quad Sm_S | JM)^2 x$$

$$x (l_1 m_{l_1} l_2 M-m_S-m_{l_1} | LM-m_S)^2 (l_1 m_{l_1} l_2 M-m_S-m_{l_1} | \lambda M-m_S)^2 \quad (C-2)$$

Lembrando que ao calcular B estamos mantendo m_S e λ fixos e que:

$$\sum_{j_1 j_2} (2j_1+1)(2j_2+1) \begin{pmatrix} L & l_1 & l_2 \\ S & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ J & j_1 & j_2 \end{pmatrix}^2 = \frac{1}{(2L+1)(2S+1)}$$

podemos escrever:

$$B = \frac{1}{2} \sum_{Mm} \sum_{\lambda_1} (LM - m_S Sm_S | JM)^2 (\lambda_1 m_{\lambda_1} \lambda_2^{M-m_S - m_{\lambda_1}} | LM - m_S)^2 \times$$

$$\times (\lambda_1 m_{\lambda_1} \lambda_2^{M-m_S - m_{\lambda_1}} | \lambda M - m_S)^2$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{Mm} \sum_{\lambda_1} (\lambda_1 m_{\lambda_1} \lambda_2^{M-m_S - m_{\lambda_1}} | \lambda M - m_S)^2 \times$$

$$\times \sum_L (\lambda_1 m_{\lambda_1} \lambda_2^{M-m_S - m_{\lambda_1}} | LM - m_S)^2 \sum_J (LM - m_S Sm_S | JM)^2$$

Como:

$$\sum_J (LM - m_S Sm_S | JM)^2 = 1$$

$$\sum_L (\lambda_1 m_{\lambda_1} \lambda_2^{M-m_S - m_{\lambda_1}} | LM - m_S)^2 = 1$$

$$\sum_{Mm} (\lambda_1 m_{\lambda_1} \lambda_2^{M-m_S - m_{\lambda_1}} | \lambda M - m_S)^2 = 2\lambda + 1$$

podemos escrever:

$$B = \frac{1}{2} (2\lambda + 1) \sum_S 1$$

Mas:

se $m_S = 0$, $\sum_S 1 = 2$ e portanto $B = 2\lambda + 1$;

se $m_S = \pm 1$, $\sum_S 1 = 1$ e portanto $B = \frac{1}{2}(2\lambda + 1)$

Então:

$$j_1 \sum \frac{(2j_1+1)}{2[\rho_1]} (-E_{n_1 z_1 j_1}^C) =$$

$$= \sum \frac{\bar{N}_{n_2 z_2}}{n_2 z_2 (2z_2+1) [\rho_1]} \sum_{n l n l \lambda} (2\lambda+1) \langle n l, n l, \lambda | n_1 z_1, n_2 z_2, \lambda \rangle^2 \times$$

$$\times \langle n l | \frac{1}{8}(\alpha+\beta) | n l \rangle$$

Usando a relação (C-1) e comparando com a (III.16) concluímos que:

$$j_1 \sum \frac{(2j_1+1)}{2[\rho_1]} (-E_{n_1 z_1 j_1}^C) = (-\bar{E}_{\rho_1}^C)$$

APÊNDICE D

Sendo:

$$v_{nl} = \langle nl | v_t | nl \rangle ,$$

$$v_0 = v_{00}, v_1 = v_{01}, v_2 = \frac{5v_{02} + v_{10}}{6}, v_3 = \frac{7v_{02} + 3v_{11}}{10},$$

$$v_4 = \frac{9v_{04} + 5v_{12} + v_{20}}{15}$$

e

$$V_{nl} = \langle nl | \bar{v} | nl \rangle = \begin{cases} \langle nl | \frac{1}{2} v_s + \frac{1}{2} v_t | nl \rangle & \text{para } l \text{ par} \\ \langle nl | \frac{1}{10} v_s + \frac{9}{10} v_t | nl \rangle & \text{para } l \text{ impar} \end{cases}$$

e $E_\alpha = E_\alpha(Z, A)$ (ver relação IV.1).

as expressões para as energias de separação de nucleons para núcleos até ^{40}Ca para um potencial soma de um potencial central com um potencial spin-órbita são dadas por:

$$\begin{aligned} - E_{1s_{1/2}} &= t_{1s_{1/2}} + \frac{3}{16} (4\bar{N}_{1s} + 2\bar{N}_{1p} + 2\bar{N}_{2s-1d}) v_0 + \frac{5}{8} (\bar{N}_{1p} + \\ &+ \bar{N}_{2s-1d}) v_1 + \frac{3}{16} \bar{N}_{2s-1d} v_2 + \frac{\sqrt{3}}{16} (2\bar{N}_{1p_{3/2}} - 4\bar{N}_{1p_{1/2}} + \\ &+ 2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 3\bar{N}_{1d_{3/2}}) v_{01} + \frac{\sqrt{5}}{80} (2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 3\bar{N}_{1d_{3/2}}) v_{02} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
- E_{1p_{3/2}} &= t_{1p_{3/2}} + \frac{1}{32} (12\bar{N}_{1s} + 8\bar{N}_{1p} + 5\bar{N}_{2s-1d}) v_0 + \\
&+ \frac{5}{96} (12\bar{N}_{1s} + 8\bar{N}_{1p} + 7\bar{N}_{2s-1d}) v_1 + \frac{1}{32} (8\bar{N}_{1p} + 7\bar{N}_{2s-1d}) v_2 + \\
&+ \frac{25}{96} \bar{N}_{2s-1d} v_3 + \frac{\sqrt{3}}{864} (108\bar{N}_{1s_{1/2}} + 36\bar{N}_{1p_{3/2}} - 18\bar{N}_{1p_{1/2}} + \\
&+ 40\bar{N}_{1d_{5/2}} - 30\bar{N}_{1d_{3/2}} - 27\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{01} + \frac{\sqrt{5}}{2160} (90\bar{N}_{1p_{3/2}} - 45\bar{N}_{1p_{1/2}} + \\
&+ 52\bar{N}_{1d_{5/2}} - 48\bar{N}_{1d_{3/2}} + 45\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{02} + \frac{\sqrt{7}}{80} (7\bar{N}_{1d_{5/2}} - \\
&- 3\bar{N}_{1d_{3/2}}) v_{03} + \frac{\sqrt{3}}{480} (2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 8\bar{N}_{1d_{3/2}} + 25\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{11}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
- E_{1p_{1/2}} &= t_{1p_{1/2}} + \frac{1}{32} (12\bar{N}_{1s} + 8\bar{N}_{1p} + 5\bar{N}_{2s-1d}) v_0 + \\
&+ \frac{5}{96} (12\bar{N}_{1s} + 8\bar{N}_{1p} + 7\bar{N}_{2s-1d}) v_1 + \frac{1}{32} (8\bar{N}_{1p} + 7\bar{N}_{2s-1d}) v_2 + \\
&+ \frac{25}{96} \bar{N}_{2s-1d} v_3 + \frac{\sqrt{3}}{432} (-108\bar{N}_{1s_{1/2}} - 9\bar{N}_{1p_{3/2}} - 36\bar{N}_{1p_{1/2}} + \\
&+ 2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 33\bar{N}_{1d_{3/2}} + 27\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{01} + \frac{\sqrt{5}}{2160} (-45\bar{N}_{1p_{3/2}} -
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 180\bar{N}_{1p_{1/2}} + 16\bar{N}_{1d_{5/2}} - 84\bar{N}_{1d_{3/2}} - 90\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{02} + \\
& + \frac{\sqrt{7}}{40} (-\bar{N}_{1d_{5/2}} - 6\bar{N}_{1d_{3/2}})v_{03} + \frac{\sqrt{3}}{240} (4\bar{N}_{1d_{5/2}} - \bar{N}_{1d_{3/2}} - \\
& - 25\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{11} \\
& - E_{1d_{5/2}} = t_{1d_{5/2}} + \frac{1}{128} (24\bar{N}_{1s} + 20\bar{N}_{1p} + 15\bar{N}_{2s-1d})v_0 + \\
& + \frac{5}{96} (12\bar{N}_{1s} + 7\bar{N}_{1p} + 5\bar{N}_{2s-1d})v_1 + \frac{1}{64} (12\bar{N}_{1s} + 14\bar{N}_{1p} + \\
& + 13\bar{N}_{2s-1d})v_2 + \frac{25}{96} (\bar{N}_{1p} + \bar{N}_{2s-1d})v_3 + \frac{15}{128} \bar{N}_{2s-1d} v_4 + \\
& + \frac{\sqrt{3}}{4320} (540\bar{N}_{1s_{1/2}} + 200\bar{N}_{1p_{3/2}} + 20\bar{N}_{1p_{1/2}} + 72\bar{N}_{1d_{5/2}} - \\
& - 18\bar{N}_{1d_{3/2}} - 45\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{01} + \frac{\sqrt{5}}{21600} (540\bar{N}_{1s_{1/2}} + 520\bar{N}_{1p_{3/2}} + \\
& + 160\bar{N}_{1p_{1/2}} + 504\bar{N}_{1d_{5/2}} - 126\bar{N}_{1d_{3/2}} + 225\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{02} + \\
& + \frac{\sqrt{7}}{800} (70\bar{N}_{1p_{3/2}} - 20\bar{N}_{1p_{1/2}} + 44\bar{N}_{1d_{5/2}} - 11\bar{N}_{1d_{3/2}} +
\end{aligned}$$

$$+ 40\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{03} + \frac{3}{160} (4\bar{N}_{1d_{5/2}} - \bar{N}_{1d_{3/2}})v_{04} + \frac{\sqrt{3}}{2400} (10\bar{N}_{1p_{3/2}} +$$

$$+ 40\bar{N}_{1p_{1/2}} + 12\bar{N}_{1d_{5/2}} - 3\bar{N}_{1d_{3/2}} + 45\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{11} +$$

$$+ \frac{\sqrt{5}}{2400} (4\bar{N}_{1d_{5/2}} - \bar{N}_{1d_{3/2}} + 35\bar{N}_{2s_{1/2}})v_{12}$$

$$- E_{2s_{1/2}} = t_{2s_{1/2}} + \frac{1}{128} (24\bar{N}_{1s} + 20\bar{N}_{1p} + 15\bar{N}_{2s-1d})v_0 +$$

$$+ \frac{5}{96} (12\bar{N}_{1s} + 7\bar{N}_{1p} + 5\bar{N}_{2s-1d})v_1 + \frac{1}{64} (12\bar{N}_{1s} + 14\bar{N}_{1p} +$$

$$+ 13\bar{N}_{2s-1d})v_2 + \frac{25}{96} (\bar{N}_{1p} + \bar{N}_{2s-1d})v_3 + \frac{15}{128} \bar{N}_{2s-1d} v_4 +$$

$$+ \frac{\sqrt{3}}{192} (-6\bar{N}_{1p_{3/2}} + 12\bar{N}_{1p_{1/2}} - 2\bar{N}_{1d_{5/2}} + 3\bar{N}_{1d_{3/2}})v_{01} +$$

$$+ \frac{\sqrt{5}}{192} (4\bar{N}_{1p_{3/2}} - 8\bar{N}_{1p_{1/2}} + 2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 3\bar{N}_{1d_{3/2}})v_{02} +$$

$$+ \frac{\sqrt{7}}{40} (2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 3\bar{N}_{1d_{3/2}})v_{03} + \frac{\sqrt{3}}{960} (50\bar{N}_{1p_{3/2}} - 100\bar{N}_{1p_{1/2}} +$$

$$+ 18\bar{N}_{1d_{5/2}} - 27\bar{N}_{1d_{3/2}})v_{11} + \frac{7\sqrt{5}}{960} (2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 3\bar{N}_{1d_{3/2}})v_{12}$$

$$\begin{aligned}
& - E_{1d_{3/2}} = t_{1d_{3/2}} + \frac{1}{128} (24\bar{N}_{1s} + 20\bar{N}_{1p} + 15\bar{N}_{2s-1d}) v_0 + \\
& + \frac{5}{96} (12\bar{N}_{1s} + 7\bar{N}_{1p} + 5\bar{N}_{2s-1d}) v_1 + \frac{1}{64} (12\bar{N}_{1s} + 14\bar{N}_{1p} + \\
& + 13\bar{N}_{2s-1d}) v_2 + \frac{25}{96} (\bar{N}_{1p} + \bar{N}_{2s-1d}) v_3 + \frac{15}{128} \bar{N}_{2s-1d} v_4 + \\
& + \frac{\sqrt{3}}{8640} (-1620\bar{N}_{1s_{1/2}} - 300\bar{N}_{1p_{3/2}} - 660\bar{N}_{1p_{1/2}} - 36\bar{N}_{1d_{5/2}} - \\
& - 216\bar{N}_{1d_{3/2}} + 135\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{01} + \frac{\sqrt{5}}{14400} (-540\bar{N}_{1s_{1/2}} - 320\bar{N}_{1p_{3/2}} - \\
& - 560\bar{N}_{1p_{1/2}} - 84\bar{N}_{1d_{5/2}} - 504\bar{N}_{1d_{3/2}} - 225\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{02} + \\
& + \frac{\sqrt{7}}{800} (-30\bar{N}_{1p_{3/2}} - 120\bar{N}_{1p_{1/2}} - 11\bar{N}_{1d_{5/2}} - 66\bar{N}_{1d_{3/2}} - \\
& - 60\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{03} + \frac{3}{160} (-\bar{N}_{1d_{5/2}} - 6\bar{N}_{1d_{3/2}}) v_{04} + \frac{\sqrt{3}}{4800} (-80\bar{N}_{1p_{3/2}} - \\
& - 20\bar{N}_{1p_{1/2}} - 6\bar{N}_{1d_{5/2}} - 36\bar{N}_{1d_{3/2}} - 135\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{11} + \\
& + \frac{\sqrt{5}}{4800} (-2\bar{N}_{1d_{5/2}} - 12\bar{N}_{1d_{3/2}} - 105\bar{N}_{2s_{1/2}}) v_{12}
\end{aligned}$$

APÊNDICE E

Dados experimentais de energias de separação utilizados.

Estado $1s_{1/2}$

Núcleo	${}^4\text{He}$	${}^6\text{Li}$	${}^7\text{Li}$	${}^{10}\text{B}$	${}^{11}\text{B}$	${}^{12}\text{C}$	${}^{14}\text{N}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{28}\text{Si}$	${}^{40}\text{Ca}$
Energia (em MeV)	19,81	22,7	25,5	31	36	35,8	42	44	47	51

Estado $1p_{3/2}$

Núcleo	${}^6\text{Li}$	${}^7\text{Li}$	${}^{10}\text{B}$	${}^{11}\text{B}$	${}^{12}\text{C}$	${}^{14}\text{N}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{19}\text{F}$	${}^{28}\text{Si}$	${}^{40}\text{Ca}$
Energia (em MeV)	4,65	9,98	6,59	11,23	15,96	20,3	19	21,2	32	36

Estado $1p_{1/2}$

Núcleo	${}^{14}\text{N}$	${}^{16}\text{O}$	${}^{19}\text{F}$	${}^{28}\text{Si}$	${}^{40}\text{Ca}$
Energia (em MeV)	7,55	12,13	13,2	27	30

Estado $1d_{5/2}$

Núcleo	$^{27}_{Al}$	$^{28}_{Si}$	$^{31}_{P}$	$^{32}_{S}$	$^{40}_{Ca}$
Energia (em MeV)	8,27	11,58	16,9	14,3	15

Estado $2s_{1/2}$

Núcleo	$^{31}_{P}$	$^{32}_{S}$	$^{35}_{Cl}$	$^{39}_{K}$	$^{40}_{Ca}$
Energia (em MeV)	7,29	8,86	6,37	6,37	10,8

Estado $1d_{3/2}$

Núcleo	$^{40}_{Ca}$
Energia (em MeV)	8,33