

Descripción microscópica de los núcleos atómicos con número impar de nucleones

Memoria que presenta para optar al grado de

Doctora en Ciencias Físicas

Sara Pérez Martín

Dirigida por el profesor

Luis Miguel Robledo Martín



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA TEÓRICA

Madrid, Noviembre 2006

Resumen

Debido al interés que despiertan los fenómenos que ocurren en los núcleos con número impar de partículas y al escaso estudio teórico que existe en torno a este tipo de núcleos, la descripción microscópica de los núcleos impares es el tema principal que se ha querido plantear en el estudio de esta tesis.

La técnica usual de bloqueo posee el condicionante de romper la simetría de inversión temporal, lo que conlleva una gran carga computacional. Por este motivo el estudio de los núcleos impares está en desventaja frente al estudio de los núcleos pares. Para evitar este inconveniente y facilitar la manejo de las dimensiones de los cálculos correspondientes se propone la, ya conocida, Aproximación de Llenado Uniforme “*Equal Filling Approximation*” como solución al problema del estudio microscópico consistente de los núcleos impares.

La novedad que aporta en este trabajo es la justificación teórica de esta propuesta de tratamiento para el nucleón desapareado del núcleo, basada en la Teoría Estadística de Temperatura Finita.

Con la aplicación a la EFA de técnicas de proyección bien conocidas se pretenden un doble fin; por un lado buscar la mejora de la descripción teórica basada en la restauración de la simetría de paridad y por otro la evaluación del acierto o desacierto (fiabilidad) de la aproximación EFA a través de la proyección para restaurar la paridad de número, que está rota a nivel de campo medio - EFA.

Toda esta metodología se ha aplicado al estudio de barreras de fisión de los núcleos ^{235}U , ^{235}Np , ^{235}Pa , ^{237}Am y ^{237}Pu , del grado de libertad octupolar en los núcleos $^{221-231}\text{Ra}$ y $^{221-231}\text{Th}$ y de la cadena de desintegración α ^{245}Es hasta ^{213}Bi . En todos los estudios realizados se ha usado la interacción efectiva de Gogny.

En el estudio de la fisión se han resuelto las ecuaciones HFB-EFA constreñidas en el momento cuadrupolar, que ha sido la coordenada elegida para generar la deformación que lleva a la escisión del núcleo. Se han evaluado las superficies de energía potencial y las masas colectivas y se han hecho predicciones de la vida media del proceso de fisión espontánea.

En el estudio del grado de libertad octupolar se han elegido dos grupos de isótopos con deformación octupolar estable conocida. Para ello se han resuelto las ecuaciones HFB-EFA constreñidas en el momento octupolar. A cada uno de los resultados obtenidos se le ha aplicado la proyección a buena paridad.

Por último se ha estimado el valor de Q_α para la cadena de desintegración α del ^{245}Es para demostrar que es factible usar las técnicas mencionadas anteriormente en el estudio de la desintegración α . En su estudio se ha aplicado la proyección a buena paridad realizando un estudio de octupolaridad en los núcleos donde convenía.

*A Tomás y Agustina, mis padres
y a Carlos.*

*Cuando veo tus cielos, obra de tus dedos,
La luna y las estrellas que tú formaste,
Digo: ¿Qué es el hombre, para que tengas de él memoria,
Y el hijo del hombre, para que lo visites?*

Salmos 8:3-4

Agradecimientos

Sin lugar a dudas mi primer agradecimiento va dirigido a Luis Robledo por muchos motivos. Primero porque me aceptó como estudiante de doctorado para realizar la tesis bajo su supervisión, porque durante estos años de trabajo ha tenido paciencia e interés para explicarme los fenómenos nucleares de un modo fácil y sencillo; y porque todavía ha sacado tiempo para enseñarme a programar en FORTRAN, hacer scripts de bash y ha resuelto innumerables problemas informáticos en mi *galilei*. Muchas gracias por el tiempo que me has dedicado.

Desde los primeros pasos de esta tesis hasta estos momentos de conclusión, he tenido el apoyo incondicional de mis padres. Gracias a su interés, sus cuestiones o dudas sobre la física me he sentido cada día motivada para trabajar.

Gracias al programa FPU del Ministerio de Educación pude disfrutar de una estancia en el Laboratorio CEA/Bruyères-le-Châtel. Allí pude trabajar con Jean-François Berger y Heloise Goutte. A ellos también les estoy muy agradecida por su tiempo y dedicación.

Gracias a José, Héctor y Fabrice por las largas conversaciones que hemos tenido; porque ha sido un placer compartir con vosotros todos esos momentos.

Mucho tiempo de estos años de tesis los he pasado entre mi despacho y el despacho de Tomás, Miguel Ángel y Javi. A ellos recurría siempre me surgían dudas nucleares o informáticas. Gracias por vuestra ayuda.

También agradezco a Nico, Pablo, David y Ana, asidua en nuestro despacho, sus interesantes conversaciones sobre la física y la vida. Gracias por las risas y el buen humor que habéis creado en el despacho.

También quiero agradecer a mis hermanos Josué y Esther el ánimo que me han dado; y espero que un día Susana y David puedan leer este trabajo, porque también a ellos va dedicado.

El último pasajero en subirse a este tren llamado Tesis ha sido Carlos. No sólo ha logrado infundirme aliento y moral para trabajar fuerte y con ganas a diario, sino que me ha ayudado a trazar un camino por el que recorrer la vida.

Aunque las personas hasta ahora nombradas han sido importantes en este trabajo, sólo existe un ser que ha sido imprescindible y *sin el cual nada de lo que ha sido hecho hubiera sido posible*. Gracias, Dios mío.

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	IX
1. Introducción	1
2. La Teoría <i>Hartree-Fock-Bogoliubov</i>	7
2.1. La transformación de <i>Bogoliubov</i>	7
2.2. Las ecuaciones de <i>Hartree-Fock-Bogoliubov</i>	12
3. Equal Filling Approximation	19
3.1. Introducción	19
3.2. Descripción de la EFA	21
3.3. Teoría estadística de campo medio	22
3.3.1. Modelo de cuasipartículas independientes	24
3.3.2. Ecuaciones FTHFB	28
3.4. Ecuaciones HFB para la EFA	30
3.4.1. Tratamiento de las ligaduras	34
3.5. Interacciones efectivas dependientes de la densidad	37
4. Los Teoremas de Wick	39
4.1. Introducción de la notación condensada	39
4.2. Teorema de Wick Estadístico Extendido	41
4.2.1. Teorema de Wick Estadístico Extendido para operadores de partículas y de cuasipartículas	47

4.2.2.	Teorema de Wick Estadístico Extendido en el límite $p \rightarrow 0$	48
4.2.3.	Teorema de Wick Estadístico Extendido en el límite $[p \rightarrow \infty]$	49
4.3.	Teorema de Wick Estadístico	53
4.3.1.	Teorema de Wick Estadístico en el límite $[p \rightarrow 0]$	55
4.3.2.	Teorema de Wick estadístico en el límite $[p \rightarrow \infty]$	55
5.	Técnicas de mejora y extensiones de la teoría HFB	57
5.1.	Restauración de Simetrías. Técnicas de proyección	58
5.2.	Aproximación Adiabática de la Teoría TDHFB	75
6.	Interacciones Nucleares	81
6.1.	Interacciones fenomenológicas efectivas	82
6.2.	Descripción de la interacción efectiva de Gogny	82
6.3.	Detalles de los cálculos	86
7.	Resultados	89
7.1.	Estudio de validez de la EFA	89
7.2.	Correlaciones octupolares	91
7.2.1.	Isótopos del Radio	100
7.2.2.	Isótopos de Torio	113
7.3.	Procesos de Fisión en núcleos actínidos ligeros	126
7.3.1.	Superficies de Energía Potencial y Espectros de los Estados Funda- mental e Isomérico de Fisión	129
7.3.2.	Correlaciones octupolares en las barreras de fisión	142
7.3.3.	Punto de escisión nuclear	142
7.3.4.	Energía de apareamiento y Masas Colectivas	143
7.3.5.	Semivida de fisión espontánea	150
7.4.	Cadena de desintegración α	154
8.	Conclusiones	167
	Apéndice	169

A. Base Axial	169
A.1. Matrices de contracción del Teorema de Wick Estadístico Extendido	172

Capítulo 1

Introducción

Los núcleos atómicos son agregados de protones y neutrones que interactúan a través de fuerzas complicadas y fuertes. A pesar de la complejidad del núcleo, existen características claras que permiten describir de modo simplificado el núcleo. Uno de estos modelos es el de la gota líquida a través del cual se deduce la fórmula semiempírica de masa de Weizsaecker. Una característica de este sencillo modelo es el término de apareamiento que representa las diferencias observadas entre núcleos pares e impares (núcleos con número impar de partículas). Los núcleos pares son más estables que los impares: todas las configuraciones que poseen mayor estabilidad, los números mágicos, son pares. El elemento más ligero que no tiene isótopos estables es el Tecnecio cuyo número de protones es $Z=43$, valor impar (es el primer núcleo sintético).

Esta diferencia par-impar se puede ver en diferentes observables como función de Z o N , como por ejemplo el tamaño nuclear. Curiosamente los núcleos impares normalmente son más pequeños que sus núcleos pares vecinos a pesar de estar menos ligados.

Al pasar a describir la estructura nuclear con teorías más complejas, como la teoría HFB basada en la generalización de las teorías *Hartree-Fock* y *BCS* [22], además de una detallada información sobre las propiedades nucleares fundamentales del núcleo (orbitales de los nucleones y sus energías, los momentos multipolares, momentos de inercia I , energías de ligadura E , probabilidades de transición, etc) se consigue identificar la ventaja energética de los núcleos pares con la existencia de pares de *Cooper* que dan lugar al fenómeno de superconductividad nuclear. En los núcleos impares, los pares de *Cooper* siguen existiendo, pero uno de los nucleones necesariamente tiene que estar desapareado.

En este punto existen diferentes técnicas para hacer el mejor tratamiento posible de este nucleón desapareado. La técnica más común es el bloqueo de un estado de cuasipartícula que impide su contribución a la dispersión de estados en la interacción de apareamiento [22] $|\phi_{impar}\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi_{par}\rangle$. Ésta técnica acarrea complicaciones en la aplicación de la teoría HFB, tales como el que buena parte de las simetrías autoconsistentes (incluyendo la inversión temporal) tienen que romperse: $\mathcal{T}\beta_k^{\dagger}|\phi\rangle = \beta_k^{\dagger}|\phi\rangle$. Eso implica que se deben considerar situaciones más generales en las que todas las simetrías del sistema se rompen, de modo que hay que trabajar con la base triaxial y no con la axial como corresponde al caso habitual en el que el núcleo no posee deformación triaxial o ésta es muy débil y poco

significativa. Como consecuencia el número de estados de la base es mayor (puesto que las matrices ya no se pueden estructurar en bloques) y las dimensiones de las matrices que se están considerando aumentan de manera importante. En la práctica esto tiene como consecuencia que el tiempo de cálculo computacional necesario para resolver las ecuaciones HFB sea muy elevado. Por este motivo la aplicación de la teoría HFB al estudio de los núcleos impares ha estado en desventaja frente al estudio de los núcleos pares.

La segunda técnica, que pretende evitar esta complicación de la ruptura de la invariancia temporal, es la *Equal Filling Approximation* (EFA) [44] [21]. La idea central de la EFA consiste en suponer que el nucleón desapareado se reparte por igual entre el orbital correspondiente y su reverso en el tiempo (se le trata como si fuese medio par de *Cooper*) evitando, de esta forma, la ruptura de la simetría de inversión temporal y permitiendo restringirse a sistemas con simetría axial.

Aunque el fundamento del método parece razonable desde un punto de vista físico, hasta la fecha ha tenido el inconveniente de carecer de justificación microscópica y variacional. Además de avalar la aproximación EFA, dicha justificación permitiría encontrar un método solvente para deducir y resolver las ecuaciones HFB-EFA. Lo que se hacía hasta ahora de forma intuitiva, era proceder de manera análoga al caso de núcleos pares en la teoría *HFB*, es decir tomar las mismas expresiones de las ecuaciones HFB pero sustituyendo las matrices densidad por sus expresiones en la aproximación EFA ρ^{EFA} y κ^{EFA} .

Otro inconveniente de la EFA, debido, nuevamente, a su ausencia de justificación, era la imposibilidad de su extensión hacia técnicas más allá de campo medio o tratamientos dependientes del tiempo, como por ejemplo la teoría Time Dependent HFB (TDHFB) o su aproximación adiabática.

Una aportación de este trabajo de tesis a la EFA es la de encontrar el argumento teórico que valida el uso de la *EFA* aprovechando la similitud de dicha aproximación con cierto límite de la teoría de HFB a temperatura finita. Al expresar la matriz densidad y el tensor de apareamiento obtenidos en la aproximación EFA a través de la matriz densidad generalizada, se encuentra que tiene la misma forma que la matriz densidad generalizada de la teoría *HFB* con temperatura finita. Dicha similitud indica que la *Equal Filling Approximation* se puede tratar como un caso particular de la teoría HFB estadística. Por tanto todos los valores esperados de los observables (Hamiltoniano, momentos multipolares, etc.) se podrán calcular como promedios estadísticos utilizando el operador densidad \mathcal{D}^{EFA} característico del límite particular de la EFA.

Con esta similitud de \mathcal{R}^{EFA} con \mathcal{R}^{FTHFB} se pasa de lo que inicialmente era una propuesta acertada pero intuitiva, a una aproximación totalmente justificada que permite obtener y resolver de un modo consistente las ecuaciones para sistemas impares a través de la teoría HFB estadística que es una teoría variacional.

La otra ventaja que se consigue con esta justificación es tener acceso a técnicas que van más allá de campo medio, como son la técnica de la proyección o el Método de la Coordenada Generadora (GCM).

Como procedimiento generalizado en la física nuclear se suele usar la aproximación de campo medio con inclusión de correlaciones que rompen ciertas simetrías. Estas correlaciones son de tipo partícula-agujero que rompen el momento angular en núcleos deformados,

o partícula-partícula de corto alcance que provocan la ruptura de la simetría del número de partículas. También hay núcleos en los que las correlaciones octupolares aportan mínimos de la energía del estado fundamental más profundos, con la pérdida asociada a la simetría bajo reflexión espacial. En lo que afecta específicamente a la EFA, la simetría de la paridad de número que indica si una función de onda describe un sistema con un número par o impar de partículas, se rompe porque tiene mezcla de contribuciones pares e impares. Por éste motivo es necesario aplicar la restauración de las simetrías perdidas a través de técnicas de proyección. Además mediante estas técnicas se consigue en la función de onda añadir mayor complejidad incluyendo más correlaciones. En este trabajo se han tenido en cuenta las proyecciones a buena paridad y a buena paridad de número.

Pero antes de realizar todos estos estudios ha sido necesario hacer un análisis sobre el grado de confianza que tienen los resultados de la EFA. Un método es comparar sus resultados con los obtenidos con la técnica habitual de bloqueo. Sin embargo como se dijo anteriormente el bloqueo lleva a considerar configuraciones en las que se rompen simetrías que, por contra, se mantienen en la EFA y por tanto es difícil hacer una comparación equitativa de los dos métodos. Más justo resulta comparar la EFA con la proyección de paridad de número ya que aquí las dos configuraciones tienen las mismas simetrías.

Por otro lado, y basado en el éxito de los modelos colectivos tales como el modelo de la gota líquida, etc, para reproducir propiedades nucleares, se ha utilizado el modelo colectivo basado en la aproximación adiabática de la teoría HFB dependiente del tiempo. En esta deducción se encuentran las expresiones que permiten estimar las masas colectivas. El objetivo que se pretende con esta estimación es estudiar, para los procesos de fisión, cuál es el valor de la semivida de la fisión espontánea.

Tanto en la teoría HFB como en las técnicas de proyección es necesario calcular muchos valores esperados o solapes de operadores fermiónicos. Gracias al Teorema de Wick se simplifica el cálculo de estos valores esperados ya sea en teorías a temperatura cero o a temperatura finita. La versión más compleja de este teorema es la versión estadística extendida, mediante la cual se pueden evaluar los valores promedios de productos de operadores de creación y destrucción de cuasipartículas a través del operador densidad \hat{D} entre estados de vacío diferentes. Como parte adicional de este trabajo de tesis se ha considerado una demostración sencilla del Teorema de Wick estadístico extendido basado en un método propuesto por Gaudin [57]. Aunque éste es el teorema de Wick más complejo, su demostración, debido a la propiedad cíclica de la traza, es la más sencilla. Posteriormente, en función de los valores que tomen las probabilidades p_i de la teoría estadística o los coeficientes de la transformación canónica \hat{T} que pasan de un estado vacío de cuasipartículas a otro, se van a poder deducir el resto de versiones del teorema, así como las expresiones que simplifican el cálculo de elementos de matriz de los operadores de cuasipartículas.

La fuerza nuclear utilizada en este trabajo ha sido la interacción fenomenológica efectiva de Gogny. Esta elección está basada en el éxito que tiene para reproducir propiedades nucleares globales en una gran parte de la tabla de núcleos. Es importante destacar que gracias a su rango finito, se puede deducir de forma autoconsistente el campo de apareamiento, lo cual da un mayor rigor a los cálculos realizados.

Desde que en 1939 *Meitner* y *Frisch* propusieron que los núcleos de Uranio se fisio- naban después de capturar neutrones, el fenómeno de la fisión ha sido objeto de muchos trabajos tanto experimentales como teóricos para dilucidar todos los mecanismos físicos

involucrados en el mismo. El gran interés despertado por el fenómeno de la fisión nuclear es debido fundamentalmente a las muchas aplicaciones prácticas que de él se derivan.

Desde un punto de vista teórico, la dinámica del fenómeno de la fisión nuclear se puede entender, a *grosso modo*, desde un punto de vista macroscópico, como la competición entre la repulsión culombiana de los protones (que favorece la fisión) y la tensión superficial nuclear (que se opone a ella). Sin embargo, esta descripción no toma en cuenta adecuadamente los efectos mecano-cuánticos asociados a la estructura de capas del núcleo, de modo que han de ser usadas teorías más sofisticadas, tales como el método de *Strutinsky* [50]. Para una comprensión profunda del fenómeno es deseable poder hacer la descripción en términos puramente microscópicos usando interacciones realistas y métodos sofisticados de muchos cuerpos, como la aproximación de campo medio (HF), o la de campo medio con correlaciones de apareamiento (HFB). Estas descripciones comenzaron a llevarse a cabo a comienzos de los años 70. En los años 80 la dinámica de la fisión empezó a estudiarse con la interacción de *Gogny*, que ha resultado ser una de las interacciones más prometedoras para el estudio de la estructura nuclear a baja energía. En los últimos años también se han aplicado los modelos relativistas a la descripción del fenómeno [27].

Una de las constantes de la descripción microscópica del fenómeno es que éste está bien caracterizado para los núcleos par-par [36], [14], [17], [18], [20] mientras que para los núcleos impares no se ha avanzado tanto, ya que un estudio sistemático de la fisión en núcleos impares no es viable computacionalmente con la técnica de bloqueo ordinaria. Por este motivo se ha decidido abordar el estudio de la fisión en núcleos impares haciendo uso de la EFA. En concreto se han estudiado las fisiones del ^{235}U , ^{235}Np , ^{235}Pa , ^{237}Am y ^{237}Pu .

Por medio de la aproximación EFA se obtienen las superficies de energía potenciales (PES) construyendo el momento cuadrupolar y gracias a la aproximación adiabática de la teoría HFB dependiente de tiempo se es capaz de deducir las inercias colectivas. Todo ello permite, gracias a la aproximación WKB, evaluar de un modo aproximado la semivida del proceso de fisión espontánea.

Mientras que las bandas rotacionales fueron la evidencia que demostraba la existencia de núcleos con deformación cuadrupolar, la aparición de estados 1^- cercanos al estado fundamental o la existencia de dobletes de estados con paridad inversa fueron la clave que impulsó al descubrimiento del fenómeno de la deformación octupolar estable.

Existen zonas bien conocidas de la tabla periódica donde aparecen núcleos con deformación octupolar. Cuando el nivel de Fermi está cercano a estados $|j_1, l_1, \pi_1\rangle$ y $|j_2, l_2, \pi_2\rangle$ cuya diferencia en momento angular y proyección del momento angular es 3 ($|j_2 - j_1| = 3$, $|l_2 - l_1| = 3$) y sus paridades cumplen son distintas ($\pi_1\pi_2 = -1$), es muy probable que los núcleos adquieran deformación octupolar. Estas combinaciones de estados se encuentran cerca de los números 34, 56, 88 y 134 de protones o neutrones.

Como segunda aplicación de la EFA al estudio de núcleos impares se ha elegido el estudio del grado de libertad octupolar en los isótopos del Radio y Torio: ^{221}Ra – ^{231}Ra y ^{221}Th – ^{231}Th , todos ellos núcleos con A impar. En ambos conjuntos de isótopos tanto el valor de Z (88 para el Radio y 90 para el Torio) como el de N (134 para el ^{222}Ra) están en la región donde se esperan fuertes correlaciones octupolares.

Como es sabido las deformaciones octupolares rompen la simetría de la paridad a nivel de campo medio, por eso resulta útil aplicar la técnica de restauración de dicha simetría gracias a la proyección [40]. Sus resultados podrán demostrar que si en algún caso la descripción EFA contiene carencias, se conocen las técnicas que permiten mejorar la descripción microscópica del fenómeno.

En los últimos años se ha dedicado un gran esfuerzo, tanto teórico como experimental, al estudio de los núcleos superpesados debido al aporte que de ellos se puede sacar para entender los límites de estabilidad de la materia [35] [33] [29] [30] [31] [32]. Gracias al descubrimiento teórico de nuevos números mágicos que indican la existencia de una zona de estabilidad alrededor de $Z = 115$ y $N = 184$ se consiguió abrir un nuevo campo de estudio novedoso e interesante, los elementos superpesados (SHE). Experimentalmente se han conseguido sintetizar núcleos transactínidos, como en GSI o Dubna donde se han llegado a producir isótopos con $Z > 104$. Paralelamente se ha seguido avanzando en el desarrollo de nuevas aproximaciones teóricas para conseguir deducir las propiedades de estos elementos superpesados.

Hay dos tipo de modelos teóricos que se utilizan para deducir las propiedades de los SHE, los basados en metodos macroscópicos-microscópicos (M-m) que toman la corrección de capas de Strutinski, y las aproximaciones microscópicas que utilizan interacciones nucleón-nucleón. Debido a la complejidad de las interacciones nucleón-nucleón, los metodos microscópicos no han llegado a conseguir los niveles de precisión de los metodos M-m para reproducir propiedades nucleares conocidas. Pero la autoconsistencia en la obtención del campo promedio a partir de las interacciones efectivas a dos cuerpos nucleón-nucleón confieren a estas teorías microscópicas mayor fiabilidad para deducir nuevas propiedades en nuevas zonas no estudiadas experimentalmente todavía.

Basado en la aproximación EFA de la teoría HFB, se ha realizado un estudio de estabilidad de ciertos núcleos superpesados impares frente a la desintegración α . Se ha tomado la cadena de desintegración α del ^{245}Es hasta el ^{213}Bi estudiando sus espectros de niveles y haciendo predicciones de los factores Q_α .

El capítulo 2 describe el pilar básico de este trabajo que es la teoría HFB, donde se introduce el concepto de cuasipartícula, se deducen las ecuaciones HFB y se estudia el método de las ligaduras para ajustar, de un modo aproximado, el valor esperado de un operador \hat{O} cualquiera. En el capítulo 3 se entra más en detalle en la descripción microscópica de los núcleos impares, analizando los distintos métodos empleados hasta ahora, con un análisis pormenorizado de la aproximación EFA junto con su justificación basada en la teoría HFB a temperatura finita.

El capítulo 4 está dedicado al Teorema de Wick. Por la necesidad de trabajar en la teoría HFB estadística es muy útil usar esta herramienta que simplifica el cálculo de valores esperados de productos de operadores. Se enuncia no sólo el teorema completo estadístico extendido, sino que se irá deduciendo a partir de éste, el resto de teoremas, hasta llegar al más sencillo que consiste en el cálculo del valor esperado de un producto de operadores entre dos estados de vacío idénticos

El capítulo 5 presenta las técnicas de proyección para restaurar la simetría de paridad y de paridad de número. Debido a la similitud de ambos operadores, en muchas deducciones se utilizan expresiones comunes válidas para ambas proyecciones. También se incluye en

este capítulo una estudio esquemático del modelo colectivo partiendo de la aproximación adiabática de la teoría dependiente del tiempo y haciendo hincapié en la deducción de las masas colectivas.

El tema de la interacción nuclear se trata en el capítulo 6. Se analiza la tendencia que ha sufrido la interacción nuclear desde su lado más puro, como las interacciones desnudas, a las interacciones más refinadas como son las fenomenológicas efectivas.

En el capítulo 7 se presentan todos los resultados obtenidos de los tres bloques básicos de análisis de validez y alcance de la EFA, como son las barreras de fisión, el fenómeno de la deformación octupolar y desintegración alfa de núcleos superpesados.

Por último en el capítulo 8 se presentan las conclusiones que se desprenden de los resultados obtenidos y se proponen perspectivas de futuro de nuevos estudios o mejoras factibles para la *Equal Filling Approximation*.

Capítulo 2

La Teoría *Hartree-Fock-Bogoliubov*

La generalización de las teorías *Hartree-Fock* y *BCS* [43] da lugar a la teoría de *Hartree-Fock-Bogoliubov* (*HFB*) [41] [22] [1], que permite deducir, a partir de la interacción nucleón-nucleón, propiedades nucleares tales como los orbitales de los nucleones φ_i y sus energías ε_i , momentos multipolares β_2, β_3, \dots , *gaps* de apareamiento Δ_α , probabilidades de ocupación v_α^2 , momentos de inercia I , energías de ligadura E y correlaciones de apareamiento protón-protón, neutrón-neutrón y protón-neutrón.

Partiendo de la premisa de la teoría *HF* según la cual las partículas se pueden considerar independientes y situadas en un potencial nuclear promedio, es razonable suponer que la función de onda del sistema puede ser descrita como el producto de las funciones de onda de cada partícula [42]. Por otro lado, de la teoría *BCS* se extraen unos nuevos entes, denominados cuasipartículas, que permiten considerar nuevas correlaciones en la teoría: el apareamiento entre partículas. Aunando ambas deducciones para crear la teoría, se concluye que las funciones de onda de tipo producto, construidas a partir de los operadores de cuasipartículas son una buena aproximación a la función de onda exacta, ya que permite tomar en consideración el mayor número de correlaciones posibles sin abandonar el esquema de campo medio.

A partir de esta premisa, la teoría *HFB* permite deducir el campo medio asumido entre nucleones. En concreto se obtienen dos potenciales promedio, el campo autoconsistente Γ , conocido de la teoría *HF*, y un campo de apareamiento adicional Δ , proveniente de la teoría *BCS*. El campo Γ contiene las correlaciones partícula-agujero de largo alcance, mientras que el campo Δ suma las correlaciones de apareamiento de corto alcance. La teoría de campo medio *HFB* es capaz de tratar de manera simultánea y auto-consistente ambos campos Γ y Δ .

2.1. La transformación de *Bogoliubov*

El concepto de cuasipartícula está asociado a la descripción del estado fundamental del núcleo como un estado vacío de cuasipartículas.

Los operadores de cuasipartículas que comúnmente se utilizan, están definidos a

partir de la transformación general de Bogoliubov. Esta transformación es la más general con dependencia lineal en los operadores de partículas.

$$\beta_k^\dagger = \sum_l \{U_{lk}c_l^\dagger + V_{lk}c_l\} \quad (2.1)$$

$$\beta_k = \sum_l \{U_{lk}^*c_l + V_{lk}^*c_l^\dagger\} \quad (2.2)$$

Los índices k y l denotan estados del espacio de configuración de la base elegida.

Es común escribir la transformación de *Bogoliubov* a través de la matriz W :

$$\begin{pmatrix} \beta_k \\ \beta_k^\dagger \end{pmatrix} = \sum_l \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix}_{kl} \begin{pmatrix} c_l \\ c_l^\dagger \end{pmatrix} = W^\dagger \begin{pmatrix} c_l \\ c_l^\dagger \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

Los coeficientes U_{lk} y V_{lk} no pueden tomar valores arbitrarios, ya que se requiere que el nuevo conjunto de operadores de cuasipartículas (β_k^\dagger, β_k) mantenga la misma relación de conmutación fermiónica que verifican los operadores de partícula (c_l^\dagger, c_l):

$$\{\beta_k, \beta_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \quad \{\beta_k, \beta_{k'}\} = 0 = \{\beta_k^\dagger, \beta_{k'}^\dagger\} \quad (2.4)$$

$$\{c_k, c_{k'}^\dagger\} = \delta_{kk'} \quad \{c_k, c_{k'}\} = 0 = \{c_k^\dagger, c_{k'}^\dagger\} \quad (2.5)$$

Por este motivo la matriz W debe generar una transformación unitaria:

$$W^\dagger W = 1 \quad \text{y} \quad W W^\dagger = 1 \quad (2.6)$$

o lo que es lo mismo las matrices U y V deben verificar lo siguiente:

$$U^\dagger U + V^\dagger V = 1 \quad U U^\dagger + V^* V^T = 1 \quad (2.7)$$

$$U^T V + V^T U = 0 \quad U V^T + V^* U^T = 0 \quad (2.8)$$

El teorema de *Bloch-Messiah* demuestra que la transformación general de *Bogoliubov* $\{c_l^\dagger, c_l\} \rightarrow \{\beta_k^\dagger, \beta_k\}$ siempre se puede descomponer en tres transformaciones especiales sucesivas:

$$W = \begin{pmatrix} D & 0 \\ 0 & D^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{U} & \bar{V} \\ \bar{V} & \bar{U} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C & 0 \\ 0 & C^* \end{pmatrix} \quad (2.9)$$

$$\left[\begin{array}{c} c \rightarrow a \\ c^\dagger \rightarrow a^\dagger \end{array} \right] \Rightarrow \left[\left\{ \begin{array}{c} a \\ a^\dagger \end{array} \right\} \rightarrow \left\{ \begin{array}{c} \alpha \\ \alpha^\dagger \end{array} \right\} \right] \Rightarrow \left[\begin{array}{c} \alpha \rightarrow \beta \\ \alpha^\dagger \rightarrow \beta^\dagger \end{array} \right] \quad (2.10)$$

$$D \quad \Rightarrow \quad \bar{U}, \bar{V} \quad \Rightarrow \quad C$$

1) La primera es una transformación unitaria de operadores de partícula $\{c^\dagger, c\}$ entre ellos mismos, como en el caso *HF*:

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger \quad (2.11)$$

Esta transformación define una nueva base, la *base canónica*.

2) La segunda es una transformación especial de *Bogoliubov* (tipo *BCS*), entre los operadores de partícula $\{a_k, a_{k'}^\dagger\}$ y los de cuasipartícula $\{\alpha_k^\dagger, \alpha_k\}$, que distingue entre niveles apareados ($u_p > 0, v_p > 0$)

$$\alpha_p^\dagger = u_p a_p^\dagger - v_p a_{\bar{p}} \quad (2.12)$$

$$\alpha_{\bar{p}}^\dagger = u_p a_{\bar{p}}^\dagger + v_p a_p \quad (2.13)$$

siendo p y \bar{p} estados de cuasipartículas canónicamente conjugados, y niveles bloqueados que están ocupados ($u_i = 0, v_i = 1$) o vacíos ($u_m = 1, v_m = 0$):

$$\alpha_i^\dagger = a_i \quad \alpha_m^\dagger = a_m^\dagger \quad (2.14)$$

$$\alpha_i = a_i^\dagger \quad \alpha_m = a_m \quad (2.15)$$

3) Por último, la tercera es una transformación unitaria de los operadores de cuasipartículas $\{\alpha_k^\dagger, \alpha_k\}$ entre ellos mismos:

$$\beta_k^\dagger = \sum_l C_{lk} \alpha_l^\dagger \quad (2.16)$$

De este teorema se concluye que la transformación general de *Bogoliubov* no es sino una transformación *BCS* en la base canónica.

Para entender de un modo físico el significado de las cuasipartículas se van a tomar casos con distintos grados de correlación partícula-partícula. Cuando las correlaciones de apareamiento tienden a cero ($u_k, v_k = 0$), las cuasipartículas son o bien partículas ($\epsilon_k > \epsilon_F$) o bien agujeros ($\epsilon_k \leq \epsilon_F$), siendo ϵ_F el nivel de *Fermi*. Por el contrario, para un grado mayor de correlación, las cuasipartículas son combinaciones de partículas y agujeros, es decir que

son simultáneamente partículas y agujeros.

El vacío de cuasipartículas y los estados de cuasipartículas

Como se decía anteriormente al hablar del concepto de cuasipartícula, el estado fundamental de un sistema nuclear de muchas partículas dentro de la aproximación *HFB*, viene dado por el estado vacío de cuasipartículas:

$$|\phi\rangle = \prod_k \beta_k |-\rangle \quad (2.17)$$

A la función de onda $|\phi\rangle$ se le denomina función de onda *HFB*. El estado $|-\rangle$ representa el vacío de partículas, y es fácil comprobar que $|\phi\rangle$ verifica dicha condición:

$$\beta_k |\phi\rangle = 0 \quad \forall k = 1, \dots, M \quad (2.18)$$

Para elegir una función de onda que satisfaga lo anterior hay que tener precaución, ya que una función de onda del tipo $|\phi\rangle = \prod \beta_k |-\rangle$ cumpliendo la propiedad $\beta_k |\phi\rangle = 0$ puede ser idénticamente nula, ya que $\beta_k^2 = 0$. El motivo de esta aclaración es asegurar que $|\phi\rangle$ no sea cero idénticamente. El modo correcto de elegir la función de onda (2.17) es tomar el número máximo de operadores β_k tal que la multiplicación de cualquier operador adicional β_l sobre el producto anterior, aniquile el resultado.

Resulta importante recordar que esta definición de $|\phi\rangle$ es siempre posible y única debido a la ortogonalidad entre la base de partículas $c_{l_1} \dots c_{l_N} |-\rangle$ ($N = 0, \dots, M$) y la de cuasipartículas $\beta_{l_1} \dots \beta_{l_N} |-\rangle$ ($N = 0, \dots, M$).

Paridad de número

Puesto que la descripción de los núcleos con número impar de nucleones es el tema central de estudio de esta tesis, conviene hacer una pequeña reseña sobre la paridad de número, antes de continuar con el desarrollo propio de la teoría.

Mientras que una función de onda con paridad de número par sólo puede describir sistemas con número par de partículas, una función de onda con paridad de número impar sólo podrá describir núcleos con número impar de partículas.

En la práctica, partiendo de un estado completamente apareado $|\phi\rangle$ con paridad de número par, que es vacío de un conjunto de operadores de cuasipartículas, es posible construir un estado de paridad de número impar, simplemente aplicando un número impar de operadores de creación de cuasipartículas β^\dagger . Análogamente se puede crear una función de onda de paridad de número par aplicando un número par de operadores de creación de cuasipartículas. Cada uno de los estados multi-cuasipartículas es por sí mismo un vacío de un conjunto particular de operadores de cuasipartículas. Ésta será a *grosso modo*, tal como se verá en el siguiente capítulo, la manera que se utilizará para crear las funciones de onda de los núcleos impares.

En cuanto al isoespín, hay que decir que la función de onda nuclear $|\phi\rangle$ que se ha tenido en cuenta en este trabajo se puede factorizar en isoespín, es decir, se escribe como producto de la función de onda de protones por la de neutrones:

$$|\phi\rangle = |\phi\rangle_\pi |\phi\rangle_\nu \quad (2.19)$$

Esta consideración implica que los apareamientos sólo son posibles entre partículas con el mismo isoespín, es decir, sólo se podrán simular los apareamientos protón-protón o neutrón-neutrón. El inconveniente de esta simplificación es que se desprecian las correlaciones de corto alcance protón-neutrón, tan importantes en núcleos con igual número de protones y neutrones y, en general, con núcleos ligeros donde las correlaciones de isoespín cero (protón-neutrón) dominan sobre las correlaciones de isoespín uno (protón-protón, neutrón-neutrón).

La matriz densidad y el tensor de apareamiento

Dentro de las propiedades de la transformación general de Bogoliubov y del vacío de cuasipartículas, es importante el papel que juegan dos cantidades, la matriz densidad ρ y el tensor de apareamiento κ . Como la transformación general de *Bogoliubov*, o los coeficientes U_{lk} y V_{lk} no están definidos de manera única por la función de onda *HFB*, es útil definir estas dos cantidades ρ y κ que contienen información no redundante y que determinan la función de onda $|\phi\rangle$ de forma única. Están definidas de la siguiente manera:

$$\rho_{ij} = \langle\phi| c_j^\dagger c_i |\phi\rangle \quad (2.20)$$

$$\kappa_{ij} = \langle\phi| c_j c_i |\phi\rangle \quad (2.21)$$

siendo $|\phi\rangle$ la función de onda *HFB* vacío de cuasipartículas.

En notación matricial sus expresiones son:

$$\rho = V^* V^T \quad (2.22)$$

$$\kappa = V^* U^T = -U V^\dagger \quad (2.23)$$

Las propiedades de transformación de ρ y κ demuestran que ρ se comporta como un operador hermítico ($\rho^\dagger = \rho$) mientras que κ lo hace como un tensor antisimétrico ($\kappa^T = -\kappa$)

Es importante comentar que para el caso ordinario de la teoría *HFB*, que es una teoría a temperatura cero, la relación que existe entre ρ y κ es:

$$\rho^2 - \rho = -\kappa \kappa^\dagger \quad \text{y} \quad \rho \kappa = \kappa \rho^* \quad (2.24)$$

La matriz densidad y el tensor de apareamiento se pueden absorber dentro de la matriz densidad generalizada:

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \langle \phi | c_j^\dagger c_i | \phi \rangle & \langle \phi | c_j c_i | \phi \rangle \\ \langle \phi | c_j^\dagger c_i^\dagger | \phi \rangle & \langle \phi | c_j c_i^\dagger | \phi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \quad (2.25)$$

Con esta definición, la matriz \mathcal{R} tiene propiedades hermíticas, lo que significa que $\mathcal{R}^\dagger = \mathcal{R}$.

Ahondando más en ella, se puede decir que los autovectores son los coeficientes *HFB* $\begin{pmatrix} U \\ V \end{pmatrix}$ para los operadores de creación de cuasipartículas con autovalor 0, y $\begin{pmatrix} V^* \\ U^* \end{pmatrix}$ para los operadores de destrucción de cuasipartículas con autovalor 1. Ésto se puede ver más claramente transformando su expresión a la base de cuasipartículas a través de la matriz W :

$$\mathcal{Q} = W^\dagger \mathcal{R} W = \begin{pmatrix} \langle \phi | \beta_s^\dagger \beta_r | \phi \rangle & \langle \phi | \beta_s \beta_r | \phi \rangle \\ \langle \phi | \beta_s^\dagger \beta_r^\dagger | \phi \rangle & \langle \phi | \beta_s \beta_r^\dagger | \phi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.26)$$

2.2. Las ecuaciones de *Hartree-Fock-Bogoliubov*

El Hamiltoniano de la teoría es el de un sistema no relativista con interacciones a dos cuerpos, cuya forma en la representación de segunda cuantización es:

$$\hat{H} = \sum_{ij} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \quad (2.27)$$

t_{ij} representa los elementos de matriz a un cuerpo que provienen de la energía cinética y \bar{v}_{ijkl} los elementos de matriz de la parte a dos cuerpos de la interacción nuclear.

El Hamiltoniano (2.27) claramente conmuta con el operador número de partículas \hat{N} :

$$\hat{N} = \sum_k c_k^\dagger c_k \quad (2.28)$$

Como la transformación de *Bogoliubov* mezcla operadores de creación y destrucción de partículas, las funciones de onda $|\phi\rangle$ violan la simetría asociada al número de partículas, lo que significa que no son autoestados del operador \hat{N} . El procedimiento adecuado para resolver este problema sería proyectar $|\phi\rangle$ a un autoestado del operador \hat{N} con autovalor N

$$P_N |\phi\rangle = |\Phi_N\rangle \quad (2.29)$$

y usar la función de onda proyectada $|\Phi_N\rangle$ como aquella que más se aproxima al estado fundamental. Pero $|\Phi_N\rangle$ no es una función de onda *HFB* y es muy difícil de tratar; por este motivo una primera aproximación al procedimiento exacto consiste en restringir el uso de las funciones de onda a aquellas que cumplan:

$$N_0 = \langle \phi | \hat{N} | \phi \rangle \quad (2.30)$$

Normalmente esta ligadura se consigue introduciendo un multiplicador de Lagrange λ_N , el potencial químico. En general, se van a poder fijar otras magnitudes, como los momentos multipolares, por medio de ligaduras, para que en valor promedio las funciones de onda tengan los valores deseados. El Hamiltoniano, tras la adición de los términos de las ligaduras, queda:

$$H' = H - \lambda_N N - \lambda_Z Z - \lambda_Q Q - \dots \quad (2.31)$$

La manera en que se determinan los multiplicadores de *Lagrange* es imponiendo los propios valores de las ligaduras sobre \hat{N} , \hat{Z} , \hat{Q}_l , etc:

$$N_0 = \langle \phi | \hat{N} | \phi \rangle \quad (2.32)$$

$$Z_0 = \langle \phi | \hat{Z} | \phi \rangle \quad (2.33)$$

$$q_l = \langle \phi | \hat{Q}_l | \phi \rangle \quad (2.34)$$

En lo que sigue y para simplificar la notación se denotará el Hamiltoniano constreñido (2.31) por H .

Resulta conveniente transformar el Hamiltoniano \hat{H} (2.31) a la base de cuasipartículas, por medio de las expresiones (2.1) y (2.2):

$$\hat{H} = H^o + \sum_{rs} H_{rs}^{11} \beta_r^\dagger \beta_s + \sum_{r<s} (H_{rs}^{20} \beta_r^\dagger \beta_s^\dagger + h.c.) + \hat{H}_{int} \quad (2.35)$$

donde:

$$H^0 = Tr \left(t\rho + \frac{1}{2} \Gamma \rho - \frac{1}{2} \Delta \kappa^* \right) \quad (2.36)$$

$$H^{11} = U^\dagger h U - V^\dagger h^T V + U^\dagger \Delta V - V^\dagger \Delta^* U \quad (2.37)$$

$$H^{20} = U^\dagger h V^* - V^\dagger h^T U^* + U \Delta U^* - V^\dagger \Delta^* V^* \quad (2.38)$$

Se denota mediante \widehat{H}_{int} al conjunto de contribuciones H^{22} , H^{31} , H^{13} , H^{40} y H^{04} , que vienen de la parte a dos cuerpos del Hamiltoniano, y que representan la interacción entre más de dos cuasipartículas. En el modelo generalizado, esta interacción entre cuasipartículas es despreciada. La expresión *h.c.* se refiere a la parte hermítica conjugada.

Para calcular el valor esperado del Hamiltoniano E^{HFB} se aplica el teorema de *Wick*, que como se verá en el capítulo 4, permite deducir los valores esperados de productos de operadores de creación y destrucción de una manera sencilla. Usando la antisimetría de los elementos de matriz \bar{v} , la expresión de la energía se reduce a:

$$\begin{aligned} E &= Tr(t\rho) + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{ki} \rho_{lj} - \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl} \kappa_{ji}^* = \\ &= Tr(t\rho) + \frac{1}{2} Tr(\Gamma\rho) - \frac{1}{2} Tr(\Delta\kappa^*) \end{aligned} \quad (2.39)$$

donde los campos autoconsistente Γ y de apareamiento Δ están definidos así:

$$\Gamma_{ik} = \sum_{lj} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj} \quad (2.40)$$

$$\Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl} \quad (2.41)$$

El campo Γ corresponde al potencial *HF*, que describe la forma de los núcleos (esférica o deformada), mientras que el potencial de apareamiento Δ determina las correlaciones de apareamiento del sistema.

Llegado a este punto es necesario preguntarse qué estado de vacío $|\phi\rangle$ proporciona la mejor aproximación a la solución de la ecuación de *Schrödinger* con la energía E más baja posible.

$$H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \quad (2.42)$$

Una buena manera de responder a esta cuestión es utilizar la equivalencia de la ecuación de *Schrödinger* y el principio variacional. Según este principio, la función de onda que mejor describe el sistema es aquella que cumple ser un mínimo de energía:

$$\frac{\delta}{\delta\phi} \frac{\langle\phi|H|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = 0 \quad (2.43)$$

Con esta ecuación se logran obtener los coeficientes U_{lk} y V_{lk} que determinan unívocamente los operadores de creación y destrucción de cuasipartículas y por ende, el estado fundamental del núcleo. El uso del principio variacional aplicado al espacio de Hilbert formado por todas las funciones de onda tipo producto $|\phi\rangle$ garantiza que la teoría es consistente.

Para imponer la condición del principio variacional se debe evaluar el valor esperado

del hamiltoniano \hat{H} en los estados $|\phi'\rangle$ cercanos a la solución. Como sólo se consideran funciones de onda tipo *HFB* se aprovecha la simplicidad del *Teorema de Thouless* para parametrizar una variación arbitraria $|\phi'\rangle$ alrededor de un punto estacionario $|\phi\rangle$ dentro del espacio generado por las funciones de onda *HFB*.

Thouless [46] dice que si $|\phi\rangle$ es un estado *HFB*, vacío de un conjunto de cuasipartículas β, β^\dagger y $|\phi'\rangle$ es otro estado *HFB*, vacío de otro conjunto de cuasipartículas γ, γ^\dagger , ambos estados están relacionados a través de la exponencial de una matriz antisimétrica Z :

$$|\phi'\rangle = N \exp\left(\sum_{i<j} Z_{ij}\beta_i^\dagger\beta_j^\dagger\right)|\phi\rangle \quad (2.44)$$

Al imponer esta forma de $|\phi'\rangle$ para resolver la ecuación (2.43) las variables Z_{ij} , que son independientes, se usan como parámetros variacionales de la teoría. La solución $|\phi\rangle$ de la ecuación variacional corresponde a $Z_{ij} = 0$.

La expansión de la exponencial de este desarrollo se llevará sólo hasta segundo orden, ya que al hacer la variación y la evaluación para $Z_{ij} = 0$, los términos de orden superior se anulan.

$$\frac{\langle\phi'|H|\phi'\rangle}{\langle\phi'|\phi'\rangle} = H^o + \begin{pmatrix} H^{20*} & H^{20} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z \\ Z^* \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \begin{pmatrix} Z^* & Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ B^* & A^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z \\ Z^* \end{pmatrix} \quad (2.45)$$

Los términos A y B tienen las expresiones:

$$A_{ijkl} = \langle\phi|[\beta_j\beta_i, [H, \beta_k^\dagger\beta_l]]|\phi\rangle \quad (2.46)$$

$$B_{ijkl} = \langle\phi|[\beta_j\beta_i, [H, \beta_k\beta_l]]|\phi\rangle \quad (2.47)$$

Para obtener las ecuaciones para la función de onda *HFB*, se puede realizar la variación con respecto a los parámetros Z_{ij}^* , ya que la variación con respecto a Z_{ij} dará como resultado la ecuación compleja conjugada. El resultado que se obtiene es:

$$\left.\frac{\partial}{\partial Z_{ij}^*} \frac{\langle\phi'|H|\phi'\rangle}{\langle\phi'|\phi'\rangle}\right|_{Z_{ij}=0} = H_{ij}^{20} = 0 \quad (2.48)$$

La condición $H_{ij}^{20} = 0$ determina sólo las dos primeras transformaciones del Teorema de *Bloch-Messiah*, ya que la ecuación variacional (2.43) no se ve afectada por la tercera transformación C de las cuasipartículas entre ellas mismas. Por tanto esta tercera transformación podrá ser usada para imponer otra condición útil, que es que la parte H^{11} del Hamiltoniano sea diagonal. En conjunto ambas condiciones equivalen a diagonalizar la

supermatriz:

$$\begin{pmatrix} H^{11} & H^{20} \\ -H^{20*} & -H^{11*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \langle \phi | \{ [\beta_r, H], \beta_s^\dagger \} | \phi \rangle & \langle \phi | \{ [\beta_r, H], \beta_s \} | \phi \rangle \\ \langle \phi | \{ [\beta_r^\dagger, H], \beta_s^\dagger \} | \phi \rangle & \langle \phi | \{ [\beta_r^\dagger, H], \beta_s \} | \phi \rangle \end{pmatrix} \quad (2.49)$$

Sin embargo, se puede hacer uso de la transformación de *Bogoliubov* y reescribir esta matriz en el espacio de los operadores de partículas c_l, c_l^\dagger :

$$\mathcal{K} = W \begin{pmatrix} H^{11} & H^{20} \\ -H^{20*} & -H^{11*} \end{pmatrix} W^+ = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

donde

$$h_{ij} = \langle \phi | \{ [c_i, \hat{H}], c_j^\dagger \} | \phi \rangle \quad (2.51)$$

$$\Delta_{ij} = \langle \phi | \{ [c_i, \hat{H}], c_j \} | \phi \rangle \quad (2.52)$$

Finalmente, con la diagonalización de la matriz \mathcal{K} , se encuentran las llamadas ecuaciones *HFB*:

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} E_k \quad (2.53)$$

donde las columnas U_k, V_k determinan los operadores de cuasipartículas β_k^\dagger, β_k . En la base correspondiente a los operadores de cuasipartículas, ambas matrices \mathcal{K} y \mathcal{R} son diagonales. Así se encuentra una expresión equivalente a $H^{20} = 0$ que es:

$$[\mathcal{K}, \mathcal{R}] = 0 \quad (2.54)$$

\mathcal{K} y \mathcal{R} conmutan porque hay una base en la que ambas tienen simultáneamente forma diagonal.

Analizando el resultado que se acaba de obtener, se observa que mediante esta ecuación se realiza una transformación a una base de cuasipartículas no interactuantes o débilmente interactuantes, ya que podemos escribir el hamiltoniano como:

$$\hat{H} = H^o + \sum_k E_k \beta_k^\dagger \beta_k + \hat{H}_{int} \quad \hat{H}_{int} \ll 1 \quad (2.55)$$

En este caso \hat{H} es diagonal y sus autoestados son el estado vacío de cuasipartículas $|\phi\rangle$ con autovalor H^o , los estados con una cuasipartícula $|\phi_k\rangle = \beta_k^\dagger |\phi\rangle$ con la energía E_k ,

los estados con dos cuasipartículas, y así sucesivamente. Los estados con número par de cuasipartículas representan los estados excitados de $|\phi\rangle$ y los estados con número impar de cuasipartículas describen los núcleos impares vecinos ($A \pm 1$) como ya se comentó al hablar de la paridad de número.

Capítulo 3

Equal Filling Approximation

3.1. Introducción

Mientras que para describir los núcleos par-par se utilizan las funciones de onda tipo producto con paridad de número par, en el caso de núcleos impares se deben considerar funciones de onda bloqueadas con paridad de número impar.

Ya se vio que la función de onda *HFB* se puede expresar como una función de onda vacío de cuasipartículas:

$$|\phi\rangle = \prod_k^M \beta_k |-\rangle \quad (3.1)$$

Si el número de operadores β_k que intervienen en el producto anterior es par (impar), el sistema tiene paridad de número positiva (negativa), es decir, la función de onda describe un núcleo par (impar). Por tanto, es posible generar la función de onda de un núcleo impar $|\phi_{impar}\rangle$, a partir de la función de onda de un núcleo par $|\phi_{par}\rangle$ simplemente multiplicándola por un operador de creación que bloquea el estado μ :

$$|\phi_{impar}\rangle = \beta_\mu^\dagger |\phi_{par}\rangle \quad (3.2)$$

Un estado bloqueado es aquel que tiene fijada su probabilidad de ocupación, ya sea porque esté ocupado, vacío o en un estado intermedio, pero no una probabilidad libre. Por eso esta función de onda $|\phi_{impar}\rangle$ se dice que es una función de onda bloqueada [22].

Mientras que $|\phi_{par}\rangle$ es un estado vacío de un conjunto de operadores β, β^\dagger , es decir:

$$\beta_\mu |\phi_{par}\rangle = \beta_\mu \beta_1 \beta_2 \cdots \beta_M |-\rangle = 0 \quad \forall i \quad (3.3)$$

la función de onda $|\phi_{impar}\rangle$ lo será para un nuevo conjunto de operadores de cua-

sipartícula, $\tilde{\beta}, \tilde{\beta}^\dagger$. Estos nuevos operadores estarán relacionados con los del sistema par, teniendo en cuenta la ecuación (3.2), de la siguiente forma:

$$\tilde{\beta}_1 = \beta_1, \tilde{\beta}_2 = \beta_2, \dots, \tilde{\beta}_\mu = \beta_\mu^\dagger, \dots, \tilde{\beta}_M = \beta_M \quad (3.4)$$

La única diferencia entre ambos conjuntos radica en el operador de destrucción μ -ésimo, que ha sido intercambiado por el operador de creación, $\beta_\mu \leftrightarrow \beta_\mu^\dagger$. En notación matricial esto equivale a intercambiar los autovectores (U_μ, V_μ) con autovalor E_μ por (V_μ^*, U_μ^*) con autovalor $-E_\mu$ en la matriz de la transformación de Bogoliubov. Se dice entonces que se ha bloqueado el estado μ -ésimo.

Tras esta modificación en la matriz de la transformación de Bogoliubov W provocada por el bloqueo del estado μ , se plantean las ecuaciones *HFB* y se resuelven de modo iterativo, comenzando con la solución del núcleo par vecino y seleccionando un estado del espectro de cuasipartículas para ser bloqueado. Las distintas elecciones del estado de cuasipartícula representan diferentes mínimos locales en la superficie de energía.

La función de onda solución de las ecuaciones *HFB* para el caso impar tendrá bloqueado su estado μ , donde se situará la partícula desapareada. Ésto significa que el nivel μ siempre estará ocupado ($v_\mu^2 = 1$), mientras que el nivel $\bar{\mu}$ (su estado conjugado o reverso en el tiempo en la base axial) siempre estará vacío ($v_{\bar{\mu}}^2 = 0$). Sólo para estados distintos al bloqueado $k \neq \mu$ las probabilidades de ocupación de éstos y de sus reversos en el tiempo son iguales $v_k^2 = v_{\bar{k}}^2$.

Con esta prescripción, el estado fundamental queda caracterizado por medio de las siguientes expresiones de ρ y κ :

$$\begin{aligned} \rho_{ij} &= (V^* V^T)_{ij} + \left\{ U_{i\mu} U_{j\mu}^* - V_{i\mu}^* V_{j\mu} \right\} \\ \kappa_{ij} &= (V^* U^T)_{ij} + \left\{ U_{i\mu} V_{j\mu}^* - V_{i\mu}^* U_{j\mu} \right\} \end{aligned} \quad (3.5)$$

El problema que se encuentra en esta descripción de niveles bloqueados, es que las funciones de onda bloqueadas rompen la inversión temporal, ya que:

$$\mathcal{T} \beta_k^\dagger |\phi\rangle = \beta_k^\dagger |\phi\rangle \quad (3.6)$$

Eso implica que se deben considerar situaciones más generales en las que todas las simetrías del sistema se rompen, de modo que hay que trabajar con la base triaxial y no con la axial habitual en el que el núcleo no posee deformación triaxial o ésta es muy débil y poco significativa. Éste es el mayor problema que supone la técnica de bloqueo que se ha visto, ya que al trabajar en la base triaxial las matrices de la transformación de Bogoliubov pierden su estructura en bloques y sus dimensiones aumentan de manera importante. Como consecuencia, el tiempo de cálculo computacional para resolver las ecuaciones *HFB* se vuelve muy elevado.

3.2. Descripción de la EFA

Para evitar el inconveniente de la ruptura de la inversión temporal por parte de la función de onda bloqueada, se suele usar la Aproximación de Llenado Uniforme (*Equal Filling Approximation*) que tiene como único motivo de ser la conservación de la invariancia temporal como simetría de la función de onda. Esta aproximación consiste en asumir que el nucleón desapareado del núcleo impar bloquea dos estados inverso temporales simultáneamente. Dicho de otro modo, si la técnica de bloqueo de la sección precedente supone que el nucleón desapareado bloquea un estado μ ($v_\mu^2 = 1$) para que ninguna otra cuasipartícula tenga acceso a él, en la aproximación *EFA*, el nucleón desapareado se reparte con igual probabilidad de ocupación entre el estado μ de más baja energía disponible y su estado inverso-temporal $\bar{\mu}$ $v_\mu^2 = v_{\bar{\mu}}^2 = \frac{1}{2}$. Con esta aproximación la matriz densidad y el tensor de apareamiento se deducen del caso de bloqueo ordinario, añadiendo las contribuciones del estado reverso temporal:

$$\rho_{ij}^{EFA} = (V^*V^T)_{ij} + \frac{1}{2} \{U_{i\mu}U_{j\mu}^* - V_{i\mu}^*V_{j\mu} + U_{i\bar{\mu}}U_{j\bar{\mu}}^* - V_{i\bar{\mu}}^*V_{j\bar{\mu}}\} \quad (3.7)$$

$$\kappa_{ij}^{EFA} = (V^*U^T)_{ij} + \frac{1}{2} \{U_{i\mu}V_{j\mu}^* - V_{i\mu}^*U_{j\mu} + U_{i\bar{\mu}}V_{j\bar{\mu}}^* - V_{i\bar{\mu}}^*U_{j\bar{\mu}}\} \quad (3.8)$$

Hasta ahora esta aproximación ha sido intuitiva, ya que es la manera más sencilla de mantener la invariancia temporal. Como no ha tenido una justificación teórica, la forma de obtener las ecuaciones *HFB* ha sido seguir los mismos pasos que se han dado en la teoría *HFB*, pero ahora con ρ^{EFA} y κ^{EFA} . De manera que, a partir de las expresiones de ρ^{EFA} y κ^{EFA} se determinan h^{EFA} y Δ^{EFA} y se construyen la ecuaciones *HFB*:

$$\begin{pmatrix} t + \Gamma^{EFA} & \Delta^{EFA} \\ -\Delta^{*EFA} & -t^* - \Gamma^{*EFA} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} E_k \quad (3.9)$$

Como ya se vio en la teoría *HFB*, estas ecuaciones son no-lineales, por tanto la obtención de sus autovectores $\begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}$ y autovalores E_k se lleva a cabo de manera iterativa.

Una vez resultas las ecuaciones, la energía se calcula como:

$$E^{EFA} = Tr(t\rho^{EFA}) + \frac{1}{2}Tr(\Gamma^{EFA}\rho^{EFA}) - \frac{1}{2}Tr(\Delta^{EFA}\kappa^{EFA*}) \quad (3.10)$$

Aunque desde el punto de vista físico esta aproximación aporta resultados muy acertados, su carencia de justificación teórica impide conectar las matrices de densidad deducidas ρ^{EFA} y κ^{EFA} con una función de onda concreta, o lo que es análogo, entre la energía (3.10) y su contenido físico.

Uno de los frutos de esta tesis es que se ha encontrado un argumento teórico que valida el uso de la *EFA*. Para encontrar su fundamento resulta útil escribir la matriz densidad y el tensor de apareamiento a través de la densidad generalizada:

$$\mathcal{R}^{EFA} = \begin{pmatrix} \rho^{EFA} & \kappa^{EFA} \\ -\kappa^{EFA*} & 1 - \rho^{EFA*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f & 0 \\ 0 & 1 - f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

donde las probabilidades de ocupación de cuasipartículas toman valores particulares:

$$f_k = \begin{cases} \frac{1}{2} & k = \mu \text{ o } k = \bar{\mu} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.12)$$

Esta forma de \mathcal{R}^{EFA} posee la misma forma que la matriz densidad generalizada de la teoría *HFB* a temperatura finita. Dicha similitud indica que la *Equal Filling Approximation* se puede tratar como un caso particular de la teoría *HFB* estadística.

A continuación se va a estudiar la teoría *HFB* estadística, para confirmar que con estos valores concretos de las probabilidades de ocupación f_k se obtienen todas las suposiciones que se hicieron al plantear la *EFA*. Además, puesto que la justificación de la *EFA* recae sobre la teoría *FTHFB*, conviene hacer un desarrollo exhaustivo hasta encontrar las ecuaciones *FTHFB* para ver las diferencias y similitudes entre ésta y la teoría a temperatura cero.

3.3. Teoría estadística de campo medio

Las reacciones nucleares con iones pesados son capaces de producir núcleos en estados muy por encima de la línea *yrast* donde hay una alta densidad de estados. Como el tiempo requerido para establecer el equilibrio térmico dentro del núcleo es pequeño comparado con el tiempo de des-excitación γ , se asume que la región por encima de la línea *yrast* se puede describir con campos medios dependientes de la temperatura. En esas regiones las teorías microscópicas a temperatura cero no son capaces de tratar esa gran cantidad de estados existentes. Éste es uno de los casos prácticos en los que el modelo teórico que describe estos estados está basado en la aproximación *HFB* a temperatura finita [37] [39].

El origen de la teoría estadística reside en la necesidad de hacer el máximo provecho de todas las informaciones que se conocen acerca del estado del sistema, ya sean completas o incompletas. De esta manera, aunque no se conozca exactamente su estado, se pueden hacer predicciones estadísticas.

La pieza fundamental de este desarrollo es el operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$, el cual facilita la aplicación simultánea de los postulados de la mecánica cuántica y los resultados de los cálculos de probabilidad. A través del operador densidad se puede representar matemáticamente el estado de cualquier sistema:

$$\hat{\mathcal{D}} = \sum_i p_i |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \quad (3.13)$$

donde $|\phi_i\rangle$ es un elemento del espacio de Hilbert completo de cuasipartículas y $p_i =$

$\langle i | \hat{\mathcal{D}} | i \rangle$ es la probabilidad de que el sistema esté en el estado $|i\rangle$.

Como este operador $\hat{\mathcal{D}}$, por definición, es hermítico, definido positivo y tiene la propiedad de que su traza es igual a la unidad $Tr \hat{\mathcal{D}} = 1$, entonces los coeficientes p_i debe satisfacer $\sum_i p_i = 1$. Su forma general es:

$$\hat{\mathcal{D}} = \frac{1}{Z} \left\{ |\phi\rangle \langle \phi| + \sum_{\mu} p_{\mu} \beta_{\mu}^{+} |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\mu} + \sum_{\mu\nu} p_{\mu} p_{\nu} \beta_{\mu}^{+} \beta_{\nu}^{+} |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\nu} \beta_{\mu} + \dots \right\} \quad (3.14)$$

donde $|\phi\rangle$ representa cada uno de los elementos del espacio de Hilbert, es decir, todos los estados con algún número de cuasipartículas, incluyendo el vacío.

Si se considera una mezcla estadística, el valor esperado de cualquier operador \hat{O} se obtiene por medio de $\hat{\mathcal{D}}$ como la traza de sus productos:

$$\langle \hat{O} \rangle = Tr \{ \hat{\mathcal{D}} \hat{O} \} \quad (3.15)$$

La traza indica una suma sobre todos los estados de cuasipartículas del espacio de Hilbert, que incluye el estado vacío de cuasipartículas y los estados con una cuasipartícula, con dos cuasipartículas, etc.

Dentro de todos los conjuntos estadísticos, el que más interesa al caso nuclear es el conjunto gran canónico, donde el sistema posee una energía y un número de partículas constante. En este conjunto, y según el principio variacional, el operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$ se obtiene minimizando el potencial gran canónico, siempre que se cumpla que la energía y el número de partículas son los deseados $\langle \hat{H} \rangle = E$ y $\langle \hat{N} \rangle = N$:

$$\Omega = E - TS - \mu N = Tr \{ \hat{\mathcal{D}} \hat{H} \} + kT Tr \{ \hat{\mathcal{D}} \ln \hat{\mathcal{D}} \} - \mu Tr \{ \hat{\mathcal{D}} \hat{N} \} \quad (3.16)$$

A partir de la ecuación variacional que minimiza el potencial termodinámico relativo a la situación considerada se deduce el operador densidad del conjunto gran canónico:

$$\frac{\delta \Omega}{\delta \hat{\mathcal{D}}} = Tr \{ \hat{H} \} + kT Tr \{ \ln \hat{\mathcal{D}} + 1 \} - \mu Tr \{ \hat{N} \} = 0 \quad (3.17)$$

$$\hat{\mathcal{D}} = \frac{1}{Tr \{ e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \}} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} = \frac{1}{\Xi} e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \quad (3.18)$$

Ξ es la función de partición, \hat{H} el Hamiltoniano y \hat{N} el operador número de partículas.

La expresión completa de la probabilidad deducida en este conjunto gran canónico es:

$$p_i = \frac{e^{-\beta(E_i - \mu N_i)}}{\text{Tr} \left(e^{-\beta(\hat{H} - \mu \hat{N})} \right)} \quad (3.19)$$

donde E_i es la energía de cada configuración.

3.3.1. Modelo de cuasipartículas independientes

Debido a la estructura del Hamiltoniano \hat{H} con operadores a uno y dos cuerpos, el operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$ así obtenido, es extremadamente complicado y es muy difícil realizar los cálculos de valores promedio tomando su expresión completa. Por tanto se debe adoptar la aproximación de campo medio, según la cual las interacciones a dos cuerpos son reemplazadas por potenciales promedio a un cuerpo. Es aquí cuando de nuevo surge el concepto de cuasipartícula. La idea esencial es encontrar una transformación a partir de los operadores de partículas, tal que las cuasipartículas sean débilmente interactuantes. Por ésto se simplifica el Hamiltoniano completo por \hat{H}^{HFB} el de un sistema de cuasipartículas independientes:

$$\hat{H} - \mu \hat{N} \simeq \hat{H}^{HFB} = E_0 + \sum_i E_i \beta_i^\dagger \beta_i \quad (3.20)$$

E_0 es la energía del vacío de cuasipartículas, E_i la energía de cuasipartículas y β_i^\dagger, β_i los operadores de cuasipartículas definidos de igual forma que en la teoría HFB convencional por medio de la transformación de Bogoliubov:

$$\beta_i^\dagger = \sum_j \{U_{ji} c_j^\dagger + V_{ji} c_j\} \quad (3.21)$$

El operador densidad en esta aproximación HFB $\hat{\mathcal{D}}^{HFB}$, se obtiene sustituyendo en la ecuación (3.18) el Hamiltoniano \hat{H}^{HFB} :

$$\hat{\mathcal{D}}^{HFB} = \Xi^{HFB-1} e^{-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i} ; \quad \Xi^{HFB} = \text{Tr} [e^{-\beta \sum_i E_i \hat{n}_i}] \quad (3.22)$$

donde $\hat{n}_i = \beta_i^\dagger \beta_i$ es el operador número de cuasipartículas. Todavía se pueden simplificar más las expresiones (3.22) desarrollando la exponencial de la función de partición gran canónico y viendo que $\hat{n}_i^m = \hat{n}_i$, siendo m un entero positivo:

$$\hat{\mathcal{D}}^{HFB} = \prod_i [f_i \hat{n}_i + (1 - f_i) (1 + \hat{n}_i)] ; \quad \Xi^{HFB} = \prod_i (1 + e^{-\beta E_i}) \quad (3.23)$$

donde los coeficientes f_i están definidos como:

$$f_i = \frac{1}{1 + e^{\beta E_i}} \quad (3.24)$$

Al igual que se hizo en la teoría a temperatura cero, se define la matriz densidad y el tensor de apareamiento de partículas como los promedios:

$$\rho_{ij} = \langle c_j^\dagger c_i \rangle = Tr(\hat{\mathcal{D}} c_j^\dagger c_i) \quad \kappa_{ij} = \langle c_j c_i \rangle = Tr(\hat{\mathcal{D}} c_j c_i) \quad (3.25)$$

Las expresiones que toman la matriz densidad $\bar{\rho}$ y el tensor de apareamiento de cuasipartículas $\bar{\kappa}$ en la base de cuasipartículas son sencillas:

$$\bar{\rho}_{ij} = \langle \beta_j^\dagger \beta_i \rangle = Tr(\hat{\mathcal{D}} \beta_j^\dagger \beta_i) = \delta_{ij} f_i \quad \bar{\kappa}_{ij} = \langle \beta_j \beta_i \rangle = Tr(\hat{\mathcal{D}} \beta_j \beta_i) = 0 \quad (3.26)$$

Se desprende, entonces, que el significado de las cantidades f_i es la probabilidad de ocupación de los estados de cuasipartículas. Para la teoría convencional *HFB*, $\beta = \infty$ todas las probabilidades de ocupación son nulas, como cabría esperar, puesto que la función de onda *HFB* es un estado vacío de cuasipartículas.

A temperatura finita f_i toma los valores $0 \leq f_i \leq 1$ y $\bar{\rho}$ representa una mezcla estadística de excitaciones de cuasipartículas. Ésta es la gran diferencia de la temperatura finita, ahora las cuasipartículas no tiene probabilidad de ocupación cero, sino que hay una distribución de excitaciones de cuasipartículas de la forma *Fermi-Dirac*. Ésto hace que se alteren las ecuaciones para la matriz densidad y el tensor de apareamiento de partículas, que se deducen invirtiendo la transformación de cuasipartículas $\beta_j = \beta_j(c_j^\dagger c_i)$ y sustituyendo los valores ya conocidos de $\bar{\rho}$ y $\bar{\kappa}$:

$$\rho = U f U^\dagger + V^*(1 - f) V^T \quad (3.27)$$

$$\kappa = U f V^\dagger + V^*(1 - f) U^T \quad (3.28)$$

La matriz densidad generalizada se define en términos de ρ y κ :

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle \phi | \beta^\dagger \beta | \phi \rangle & \langle \phi | \beta \beta | \phi \rangle \\ \langle \phi | \beta^\dagger \beta^+ | \phi \rangle & \langle \phi | \beta \beta^\dagger | \phi \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \quad (3.29)$$

siendo $\mathcal{Q} = W^\dagger \mathcal{R} W$ la matriz densidad generalizada de cuasipartículas.

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} \langle \phi | \beta^\dagger \beta | \phi \rangle & \langle \phi | \beta \beta | \phi \rangle \\ \langle \phi | \beta^\dagger \beta^+ | \phi \rangle & \langle \phi | \beta \beta^\dagger | \phi \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f & 0 \\ 0 & 1 - f \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

Para $T = 0$, \mathcal{Q} y \mathcal{R} están altamente degenerados con autovalores 0 y 1 y se cumple que $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$. Esta degeneración está causada por la arbitrariedad en la definición de las transformaciones de cuasipartícula con $T = 0$. Sin embargo a temperatura finita la degeneración se rompe y los autovalores de \mathcal{Q} y \mathcal{R} son iguales a f_k y $1 - f_k$. Excepto por

degeneraciones accidentales en f_k , las transformaciones de cuasipartículas están unívocamente determinadas cuando $T \neq 0$. Por tanto ahora se cumple $\mathcal{R}^2 \neq \mathcal{R}$.

Es en la forma (3.29) donde se encuentra la similitud con \mathcal{R}^{EFA} , simplemente fijando unos valores particulares de f :

$$f_k = \begin{cases} \frac{1}{2} & k = \mu \quad \text{ó} \quad k = \bar{\mu} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.31)$$

Por tanto para deducir el valor promedio de cualquier operador, se podrá utilizar el operador densidad aproximado de EFA :

$$\hat{\mathcal{D}}^{EFA} = \frac{1}{\Xi^{EFA}} (1 + 2\hat{n}_\mu + 2\hat{n}_{\bar{\mu}} + 4\hat{n}_\mu\hat{n}_{\bar{\mu}}) \quad (3.32)$$

$$\hat{\mathcal{D}}_{EFA} = \frac{1}{Z} \{ |\phi\rangle \langle \phi| + \beta_\mu^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_\mu + \beta_{\bar{\mu}}^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\bar{\mu}} + \beta_\mu^+ \beta_{\bar{\mu}}^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\bar{\mu}} \beta_\mu \}$$

$$\Xi^{EFA} = \prod_i (1 + e^{-\beta E_i}) = 4 \quad (3.33)$$

El haber encontrado una base sólida para la EFA que la simple intuición que se tenía inicialmente permite, no sólo situarse en una teoría autoconsistente, sino que además confiere un sentido físico a las densidades de partículas que inicialmente carecían de significado. Para buscar ese sentido físico de la EFA , se calcula la energía de la EFA como el promedio estadístico del Hamiltoniano:

$$E = Tr(\hat{\mathcal{D}}\hat{H}) = \frac{1}{\Xi} \sum_{\{n\}} \langle \phi | \beta_1, \dots, \beta_i H \beta_1^\dagger, \dots, \beta_i^\dagger | \phi \rangle e^{-\beta(E_1 + \dots + E_i)} \quad (3.34)$$

Como ya se ha visto, la EFA posee unos valores fijos de las probabilidades de ocupación, que traducidos a las exponenciales $e^{-\beta E_k}$ son:

$$p_k = e^{-\beta E_k} = \begin{cases} 1 & k = \mu \quad \text{ó} \quad k = \bar{\mu} \\ 0 & \text{en cualquier otro caso} \end{cases} \quad (3.35)$$

Hay que distinguir entre las magnitudes p_k que es la probabilidad estadística y f_k que es la probabilidad de ocupación de los estados de cuasipartículas.

De lo cual se deduce la expresión estadística para el valor promedio de la energía:

$$E^{EFA} = \frac{1}{4} \left\{ \langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle + \langle \phi | \beta_\mu \hat{H} \beta_\mu^\dagger | \phi \rangle + \langle \phi | \beta_{\bar{\mu}} \hat{H} \beta_{\bar{\mu}}^\dagger | \phi \rangle + \langle \phi | \beta_\mu \beta_{\bar{\mu}} \hat{H} \beta_{\bar{\mu}}^\dagger \beta_\mu^\dagger | \phi \rangle \right\} \quad (3.36)$$

La interpretación de este resultado es que la energía en la aproximación *EFA* para un núcleo impar se puede expresar como el promedio de cuatro núcleos: el núcleo par vecino, el núcleo impar que tiene bloqueado el estado de cuasipartícula μ , otro núcleo impar que tiene bloqueado el estado $\bar{\mu}$ y el núcleo par vecino que tiene dos cuasipartículas a la vez bloqueando los niveles μ y $\bar{\mu}$. Ésto es lo que faltaba por deducir de la expresión inicial de la energía:

$$E^{EFA} = Tr(t\rho^{EFA}) + \frac{1}{2}Tr(\Gamma^{EFA}\rho^{EFA}) - \frac{1}{2}Tr(\Delta^{EFA}\kappa^{EFA*}) \quad (3.37)$$

Aunque se haya encontrado el fundamento de la *EFA* como caso particular de la teoría *FTHFB*, es conveniente continuar el desarrollo general de dicha teoría para obtener las ecuaciones de los coeficientes U y V .

Una vez que se han definido y se conocen las expresiones de ρ y κ , se puede calcular la energía interna del sistema como el valor esperado de $\langle \hat{H} \rangle$. Para evaluar el promedio del operador a dos cuerpos hay que proponer una estrategia de cálculo. A temperatura finita se obtiene un conjunto estadístico de excitaciones de cuasipartículas, por tanto el vacío de cuasipartículas ya no puede servir como estado de referencia para definir los productos normales del teorema de Wick. Sin embargo este teorema, en su versión estadística, sigue siendo válido para calcular el promedio del producto de operadores:

$$\langle c_i^+ c_j^+ c_l c_k \rangle = \langle c_i^+ c_k \rangle \langle c_j^+ c_l \rangle - \langle c_i^+ c_l \rangle \langle c_j^+ c_k \rangle + \langle c_i^+ c_j^+ \rangle \langle c_l c_k \rangle \quad (3.38)$$

La expresión de la energía interna que se obtiene es:

$$E = Tr \left[t + \frac{1}{2}\Gamma \right] \rho + \frac{1}{2}\Delta\kappa^+ \quad (3.39)$$

donde el Hamiltoniano *HF* h , el potencial *HF* Γ , y el potencial de apareamiento Δ , vienen dados por las expresiones:

$$h = t - \mu + \Gamma \quad (3.40)$$

$$\Gamma_{ik} = \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj} \quad \Delta_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl} \quad (3.41)$$

Se puede observar que la energía (3.39) y los potenciales (3.41) tienen la misma forma ya sea con temperatura finita o con temperatura cero.

Por último queda calcular el valor promedio de la entropía y del número de partículas en la aproximación *HFB* para obtener el potencial gran canónico, que más tarde se utilizará para deducir las ecuaciones *FTHFB*:

$$\Omega = \sum_{ij} (t - \mu)_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \rho_{lj} \rho_{ki} + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} v_{ijkl} \kappa_{ij}^* \kappa_{kl} + \quad (3.42)$$

$$+ kT \sum_k [f_k \ln f_k + (1 - f_k) \ln(1 - f_k)]$$

3.3.2. Ecuaciones FTHFB

Las ecuaciones *FTHFB* se obtienen por medio de la minimización del potencial gran canónico:

$$\delta\Omega = 0 \quad (3.43)$$

Los grados de libertad de esta teoría residen en los parámetros variacionales U , V y f . Una diferencia que aparece con respecto a la teoría *HFB* convencional es que hay un nuevo parámetro variacional más, la probabilidad de ocupación f .

En lo que respecta a las variaciones δU y δV , uno de los primeros requisitos que tendrán que cumplir es que la transformación de Bogoliubov para las cuasipartículas debe ser unitaria; de forma que dichas variaciones no van a ser independientes, sino que dependerán de los valores de U y V . Para encontrar los valores δU y δV se van a considerar las siguientes transformaciones unitarias infinitesimales:

$$\begin{pmatrix} \beta'_k \\ \beta'^{\dagger}_k \end{pmatrix} = \sum_l \left[1 + \begin{pmatrix} \varepsilon_1^+ & \varepsilon_2^+ \\ \varepsilon_2^T & \varepsilon_1^T \end{pmatrix}_{kl} \right] \begin{pmatrix} \beta_l \\ \beta_l^\dagger \end{pmatrix} = \sum_l \begin{pmatrix} U'^{\dagger} & V'^{\dagger} \\ V'^T & U'^T \end{pmatrix}_{kl} \begin{pmatrix} c_l \\ c_l^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.44)$$

donde $\varepsilon_1^+ = -\varepsilon_1$ y $\varepsilon_2^T = -\varepsilon_2$. De aquí se obtiene que las variaciones δU y δV deben tener la forma:

$$\delta U = \varepsilon_1 U + \varepsilon_2 V^* \quad (3.45)$$

$$\delta V = \varepsilon_1 V + \varepsilon_2 U^* \quad (3.46)$$

Trasladando esta variaciones infinitesimales, a ρ y κ se obtiene que:

$$\rho' = \rho + \delta\rho \quad \text{donde} \quad \delta\rho = U(\delta\bar{\rho})U^\dagger - V^*(\delta\bar{\rho})V^T + U(\delta\bar{\kappa})V^T - V^*(\delta\bar{\kappa})^*U^\dagger \quad (3.47)$$

$$\kappa' = \kappa + \delta\kappa \quad \text{donde} \quad \delta\kappa = U(\delta\bar{\rho})V^\dagger - V^\dagger(\delta\bar{\rho})U^T + U(\delta\bar{\kappa})U^T - V^*(\delta\bar{\kappa})V^\dagger \quad (3.48)$$

donde la variación de la matriz densidad y tensor de apareamiento de cuasipartículas es:

$$\delta\bar{\rho} = \delta f + [f, \varepsilon_1^*]_- \quad (3.49)$$

$$\delta\bar{\kappa} = -\varepsilon_2^* + [f, \varepsilon_2^*]_+ \quad (3.50)$$

Por último llevando todas estas variaciones a la expresión del potencial gran canónico (3.42), se consigue:

$$\Omega' = \Omega + \delta\Omega \text{ donde } \delta\Omega = Tr \left[(t - \mu + \Gamma) \delta\rho + \frac{1}{2} (\Delta\delta\kappa^\dagger + c.c.) + kT \sum_k \ln \left(\frac{f_k}{1-f_k} \right) \delta f_k \right] \quad (3.51)$$

En la base de cuasipartículas, ésta forma de $\delta\Omega$ se puede escribir como:

$$\delta\Omega = Tr \left[(H^{11} - E) (\delta\rho) + \frac{1}{2} \{ (H^{20})^+ (\delta\kappa)^\dagger + h.c. \} \right] \quad (3.52)$$

siendo $E_{kl} = \delta_{kl} E_k$

$$E_k = kT \ln \left(\frac{1-f_k}{f_k} \right) \quad (3.53)$$

H^{20} y H^{11} tienen la misma definición que en el caso a temperatura cero, excepto porque h y Δ ahora tienen una dependencia con la temperatura.

Ya sólo queda imponer que la variación infinitesimal del potencial gran canónico sea cero $\delta\Omega = 0$, para despejar la condición para los coeficientes de la transformación de Bogoliubov que mejor describen el sistema. Las condiciones que se deben verificar son:

$$H^{11} = E \quad H^{20} = 0 \quad (3.54)$$

Se puede observar que son las mismas que se obtuvieron en la teoría HFB convencional tras aplicar el principio variacional, por lo que las ecuaciones *FTHFB* consisten también en la diagonalización de la supermatriz:

$$\begin{pmatrix} H^{11} & H^{20} \\ -H^{20*} & -H^{11*} \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

que en la base de cuasipartículas se convierte en la ya conocida expresión:

$$\begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

Es interesante notar que la energía E_k , que aparecía en la ecuación de las probabilidades de ocupación f_k es, de hecho, la energía de los estados de cuasipartículas. Las ecuaciones *FTHFB* tienen la misma forma que las ecuaciones *HFB*, ya que no hay términos adicionales en las definiciones de los potenciales *HF* y de apareamiento. Pero no es tan obvio que esto ocurra, ya que la teoría *FTHFB* incluye no sólo la energía del vacío de cuasipartículas $\langle H_0 \rangle$, sino también las energías de excitación de cuasipartículas $\langle H^{11} \rangle$ y las interacciones entre las cuasipartículas $\langle H^{22} \rangle$. La única diferencia notable es que las probabilidades de ocupación de cuasipartículas f_k son distintas de cero para temperatura finita y consecuentemente las densidades de partícula ρ y κ tienen diferentes expresiones a temperatura cero que a temperatura finita.

3.4. Ecuaciones HFB para la EFA

En el apartado anterior se ha desarrollado toda la teoría *FTHFB* partiendo de las premisas de la teoría estadística y llegando hasta las ecuaciones de los coeficientes U y V de la transformación de Bogoliubov. Este desarrollo ha sido general y completo. Lo que se verá en esta sección será la particularización al caso de la *EFA*, por lo que se aplicara de nuevo el principio variacional y se llegará hasta las ecuaciones *HFB-EFA* finales. El motivo de hacer esto es que sistematiza la metodología de deducción de las ecuaciones y aclara temas como la acometida del principio variacional, o el orden de desarrollo de las expresiones variaciones. Por último se considera el caso del Hamiltoniano con ligaduras, lo cual conlleva una reestructuración de las ecuaciones.

Al igual que se ha tomado la matriz densidad generalizada, para agrupar las matrices de densidad ρ y κ , el Hamiltoniano a uno y dos cuerpos también se puede tratar mediante las matrices \mathcal{H} y \mathcal{T} , definidas así:

$$\mathcal{H} = W\mathbb{H}W^\dagger = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} H^{11} & H^{20} \\ -H^{20*} & -H^{11*} \end{pmatrix} \quad (3.58)$$

Y \mathcal{T} es la matriz de la energía cinética:

$$\mathcal{T} = \begin{pmatrix} t & 0 \\ 0 & -t^* \end{pmatrix} \quad (3.59)$$

Otra matriz densidad de naturaleza muy parecida a \mathcal{R} es σ , que será de gran utilidad para los próximos pasos:

$$\sigma = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & -\rho^* \end{pmatrix} = \mathcal{R} - \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.60)$$

Como ya se vio para la teoría *HFB*, la solución de la función de onda proviene del principio de minimización de la energía. Por el contrario en la teoría estadística el estado de equilibrio de un sistema aislado es aquel de máximo peso estadístico, o lo que es lo mismo máxima entropía. Esta condición fija simultáneamente tanto el operador densidad \hat{D} como las probabilidades de ocupación f . En la *EFA*, que puede ser tratada como un caso particular de la teoría *FTHFB*, las probabilidades de ocupación de los estados de cuasipartículas están fijados, que sería como decir que la entropía es constante y no se requiere su principio de maximización. Ésto lleva al mismo principio variacional que el que se utilizó en la teoría *HFB*, es decir, el operador densidad que mejor describe el estado fundamental del sistema, es aquel que minimiza la energía interna.

El procedimiento que se seguirá aquí para buscar el estado de mínima energía es tomar variaciones de una función de onda inicial $|\phi(0)\rangle$ por medio de una transformación unitaria de parámetro \mathbb{Z} , condición ésta necesaria para seguir tratando funciones de onda *HFB*, e imponer que las variaciones en la energía hasta primer orden en \mathbb{Z} provocadas por esta transformación son cero.

Las variaciones infinitesimales que se provocan en la función de onda $\langle\phi|$ se implementarán mediante las modificaciones en la matriz densidad generalizada \mathcal{R} y en la nueva matriz σ ($\delta\mathcal{R}$ y $\delta\sigma$) ya que estas modificaciones tienen en su origen los cambios de las funciones de onda por medio de W (δW).

Según el principio variacional se tendrá que cumplir la condición $\frac{\delta\langle H \rangle}{\delta\mathbb{Z}} = 0$, por medio de la cual se despeja \mathbb{Z} y se obtiene la solución de la función de onda del estado de equilibrio. Dada una función de onda $|\phi\rangle$ que está asociada a una transformación de Bogoliubov $W(0)$, otra función de onda del tipo HFB $|\phi'\rangle = |\phi\rangle + |\delta\phi\rangle$, estará relacionada con $|\phi\rangle$ a través de la exponencial de un operador a un cuerpo Z hermítico $|\phi'\rangle = e^{iZ} |\phi\rangle$. Dichas transformaciones llevan asociada una expresión de la forma:

$$W(z) = W(0)e^{i\mathbb{Z}} \quad (3.61)$$

donde \mathbb{Z} es la matriz de la representación de \hat{Z} en la base de cuasipartículas $\mathcal{Z} = W\mathbb{Z}W^\dagger$

$$\mathbb{Z} = \begin{pmatrix} Z^{11} & Z^{20} \\ -Z^{20*} & -Z^{11*} \end{pmatrix} \quad (3.62)$$

$$\hat{Z} = \mathcal{Z}^0 + \frac{1}{2}Tr[Z^{11}] + \frac{1}{2}\sum_{\mu\nu} Z_{\mu\nu}\beta_\mu^\dagger\beta_\nu \quad (3.63)$$

Ahora, la matriz densidad generalizada en z será:

$$\mathcal{R}(z) = W(z)\mathcal{R}(0)W^\dagger(z) = W(z)\mathcal{R}(0)W^\dagger(z) \quad (3.64)$$

Esto es válido siempre que se asuma que las probabilidades de ocupación no cambian con la transformación $|\phi\rangle \rightarrow e^{iZ}|\phi\rangle$, es decir los estados que están bloqueados se mantienen así transformación tras transformación. La matriz densidad original, antes de la variación, es:

$$\mathcal{R}(0) = W(0)\mathbb{R}W^\dagger(0) = W(0) \begin{pmatrix} f & 0 \\ 0 & 1-f \end{pmatrix} W^\dagger(0) \quad (3.65)$$

Con estas expresiones de $\mathcal{R}(z)$ y $\mathcal{R}(0)$, se obtiene que la variación de la matriz densidad $\delta\mathcal{R}$ es:

$$\delta\mathcal{R} = \mathcal{R}(z) - \mathcal{R}(0) = \delta W\mathbb{R}W^\dagger(0) + W(0)\mathbb{R}\delta W^\dagger + \delta W\mathbb{R}\delta W^\dagger \quad (3.66)$$

Con las matrices generalizadas \mathcal{H} , \mathcal{T} y σ la energía interna del sistema (3.39) que hay que minimizar es:

$$\langle H \rangle = \frac{1}{4} \text{Tr} [(\mathcal{H} + \mathcal{T}) \sigma] \quad (3.67)$$

La variación de la energía se calcula como la diferencia entre las energías $\langle H \rangle(z)$ y $\langle H \rangle(0)$, para ello es necesario calcular la energía variada:

$$\mathcal{H}_{\mu\nu}(z) = \mathcal{T}_{\mu\nu} + \frac{1}{2} \sum_{\rho\sigma} \nu_{\mu\nu\rho\sigma} \mathcal{R}_{\sigma\rho}(z) = \mathcal{H}_{\mu\nu}(0) + \frac{1}{2} \sum_{\rho\sigma} \nu_{\mu\nu\rho\sigma} \delta\mathcal{R}_{\sigma\rho} \quad (3.68)$$

Por sencillez en la expresión, se va a utilizar la notación de *Balian* y *Brezin* [58] para escribir los productos de matrices:

$$(\nu : \delta\mathcal{R})_{\mu\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\rho\sigma} \nu_{\mu\nu\rho\sigma} \delta\mathcal{R}_{\sigma\rho} \quad (3.69)$$

$$A : B = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} A_{\mu\nu} B_{\nu\mu} \quad (3.70)$$

La novedad en este método es que el orden de desarrollo de las variaciones llega hasta segundo orden:

$$\langle H \rangle(z) = \langle H \rangle(0) + \mathcal{H}(0) : \delta\mathcal{R} + \frac{1}{2} [\delta\mathcal{R} : \nu : \delta\mathcal{R}] \quad (3.71)$$

Ya se puede deducir la forma que tiene la variación en la energía debida a una pequeña perturbación en la función de onda:

$$\delta \langle H \rangle(z) = \mathbb{H} : \delta\mathbb{R} + \frac{1}{2} \delta\mathbb{R} : \widetilde{\mathbb{W}} : \delta\mathbb{R} \quad (3.72)$$

Sustituyendo la variación $\delta\mathbb{R}$ a segundo orden y teniendo una dependencia explicita de \mathbb{Z} para poder derivar $\delta\langle H \rangle$ con respecto a $\delta\mathbb{Z}_{\mu\nu}$ se obtiene:

$$\begin{aligned} \delta\langle H \rangle = & -\frac{i}{2} \sum_{\mu\nu} [\mathbb{R}, \mathbb{H}]_{\mu\nu} \mathbb{Z}_{\nu\mu} - \frac{1}{4} \sum_{\rho\sigma\sigma'} \mathbb{H}_{\rho\sigma} \mathbb{Z}_{\sigma\sigma'} \mathbb{Z}_{\sigma'\rho} [\rho_\rho - 2\rho_{\sigma'} + \rho_\sigma] - \\ & -\frac{1}{8} \sum_{\mu\nu\rho\sigma} \mathbb{Z}_{\nu\mu} [\rho_\mu - \rho_\nu] \widetilde{W} \mathbb{Z}_{\rho\sigma} [\rho_\rho - \rho_\sigma] + \dots \end{aligned} \quad (3.73)$$

donde se ha introducido ρ_μ como los elementos diagonales de \mathbb{R} , es decir, $\mathbb{R}_{\mu\nu} = \rho_\mu \delta_{\mu\nu}$.

La condición de mínimo $\frac{\delta\langle H \rangle}{\delta\mathbb{Z}_{\mu\nu}} = 0$ permite encontrar la forma de $\mathbb{Z}_{\mu\nu}$:

$$\frac{\delta\langle H \rangle}{\delta\mathbb{Z}_{\mu\nu}} = \frac{i}{2} [\mathbb{R}, \mathbb{H}]_{\mu\nu} - \quad (3.74)$$

$$-\frac{1}{4} \sum_{\rho\sigma} \mathbb{Z}_{\sigma\rho} \left\{ (\mathbb{H}_{\rho\mu} \delta_{\sigma\nu} - \mathbb{H}_{\nu\sigma} \delta_{\mu\rho}) [\rho_\mu - \rho_\nu + \rho_\rho - \rho_\sigma] + \widetilde{W}_{\mu\nu\rho\sigma} [\rho_\nu - \rho_\mu] [\rho_\rho - \rho_\sigma] \right\}$$

Para evitar invertir un tensor de cuatro índices se va a tomar una aproximación que consiste en suponer que \mathbb{H} es diagonal con valores iguales a las energías de los cuasiestados \bar{E}_μ ($\mathbb{H}_{\mu\nu} = \bar{E}_\mu \delta_{\mu\nu}$). En este caso:

$$\frac{\delta\langle H \rangle}{\delta\mathbb{Z}_{\mu\nu}} \simeq \frac{i}{2} (\rho_\nu - \rho_\mu) \mathbb{H}_{\nu\mu} - \frac{1}{2} \mathbb{Z}_{\nu\mu} (\bar{E}_\mu - \bar{E}_\nu) (\rho_\mu - \rho_\nu) \quad (3.75)$$

De aquí se despeja $\mathbb{Z}_{\nu\mu}$ que representa la transformación unitaria que hace verificar el principio variacional:

$$\mathbb{Z}_{\nu\mu} = i \frac{(\rho_\nu - \rho_\mu) \mathbb{H}_{\nu\mu}}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu) (\rho_\nu - \rho_\mu)} \quad (3.76)$$

Cuando $\rho_\nu = \rho_\mu$ el gradiente es cero directamente y se puede tomar $\mathbb{Z}_{\nu\mu} = 0$. Para recordarlo y tenerlo en cuenta, se introduce la matriz $\Delta(\rho_\nu, \rho_\mu)$ definida de la siguiente forma:

$$\Delta(\rho_\nu, \rho_\mu) = \begin{cases} 0 & \text{si } \rho_\nu = \rho_\mu \\ 1 & \text{si } \rho_\nu \neq \rho_\mu \end{cases} \quad (3.77)$$

Con la matriz \mathbb{Z} recién deducida, la variación de la energía que se obtiene a primer orden en \mathbb{Z} será:

$$\delta \langle H \rangle = \frac{i}{2} \text{Tr} \{ [\mathbb{R}, \mathbb{H}] \mathbb{Z} \} = -\frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{(\rho_\mu - \rho_\nu)}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} |\mathbb{H}_{\mu\nu}|^2 \Delta(\rho_\mu, \rho_\nu) \quad (3.78)$$

Para que la modificación vaya en la buena dirección, esta cantidad $\delta \langle H \rangle$ ha de ser negativa, lo cual se cumple si $\frac{(\rho_\mu - \rho_\nu)}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} \geq 0$. Cuando la ρ_μ es función de \bar{E}_μ no hay problema, ya que $\rho_\mu(\bar{E}_\mu)$ es una función decreciente. En el caso de la *EFA* habrá que tener cuidado porque las ρ están fijadas. Aún así no parece haber problema si la energía del estado de cuasipartículas bloqueada es la menor de todas.

Los valores de las probabilidades de ocupación serán:

$$\rho_\mu = f_\mu \quad \rho_{\bar{\mu}} = 1 - f_\mu \quad \mu > 0 \quad (3.79)$$

Y los valores diagonales de la matriz \mathbb{H} , \bar{E}_μ y $\bar{E}_{\bar{\mu}}$ son:

$$\bar{E}_\mu = E_\mu \quad \bar{E}_{\bar{\mu}} = -E_\mu \quad (3.80)$$

Finalmente los bloques de la matriz \mathbb{Z} tienen la forma:

$$Z_{\nu\mu}^{11} = i \frac{H_{\nu\mu}^{11}}{E_\nu - E_\mu} \Delta(f_\mu, f_\nu) \quad (3.81)$$

$$Z_{\nu\mu}^{20} = i \frac{H_{\nu\mu}^{20}}{E_\nu + E_\mu} \Delta(f_\mu, 1 - f_\nu) \quad (3.82)$$

Una vez obtenido \mathbb{Z} se puede determinar la nueva función de onda W mediante $W = W(0)e^{i\mathbb{Z}}$. Como éstas son ecuaciones no lineales, la solución final no se encuentra, sino después de un proceso iterativo en el que tras dos iteración sucesivas la matriz W permanece inalterada.

La filosofía de este método para las ecuaciones *HFB-EFA* ha sido el de encontrar un punto de mínimo en la superficie de energía mediante una transformación en la dirección del gradiente obtenida por las expresiones a primer orden y de magnitud \mathbb{Z} proveniente del término a segundo orden.

3.4.1. Tratamiento de las ligaduras

Las soluciones de *HFB-EFA* sin restringir, sólo dan un punto en la superficie de energía, llamado el mínimo local. Pero también es interesante estudiar otros puntos de la superficie que tenga diferentes valores de variables colectivas. Para ello se pueden imponer condiciones de ligadura y buscar el mínimo de energía en la hipersuperficie definida por ellas. A veces se querrá calcular la superficie de energía como función de uno o varios parámetros colectivos q , como las deformaciones cuadrupolares, hexadecupolares, etc. En resumen este método trata de investigar un sistema de muchos cuerpos en presencia de un

campo externo \widehat{Q} que lo deforma de una cierta manera.

En este formalismo se busca la función de onda $|\Phi(q)\rangle$, que minimiza la energía total imponiendo que cierto operador monoparticular \widehat{Q} tenga un valor esperado fijo.

$$q = \langle \Phi | \widehat{Q} | \Phi \rangle \quad (3.83)$$

Como ya se vio en la teoría *HFB*, cuando se tienen ligaduras sobre un conjunto de operadores \widehat{Q}_i , el método mas simple es añadir las condiciones (3.83) al Hamiltoniano \widehat{H} :

$$\widehat{H}' = \widehat{H} - \sum_i \lambda_i \widehat{Q}_i \quad (3.84)$$

donde los λ_i son multiplicadores de *Lagrange* que se determinan imponiendo a la función $|\Phi\rangle$ que verifique (3.83).

Desarrollando este método con más detalle es conveniente introducir las matrices:

$$\mathcal{Q} = \begin{pmatrix} Q & 0 \\ 0 & -Q^* \end{pmatrix} \quad (3.85)$$

y

$$\mathbb{Q} = W^\dagger \mathcal{Q} W = \begin{pmatrix} Q_i^{11} & Q_i^{20} \\ -Q_i^{20*} & -Q_i^{11*} \end{pmatrix} \quad (3.86)$$

que representan el operador \widehat{Q} en la base de partículas y cuasipartículas respectivamente.

se tiene que:

$$\langle \widehat{Q} \rangle = \frac{1}{2} Tr(\mathcal{Q}\sigma) \quad (3.87)$$

Las variaciones que puede sufrir el valor esperado del operador \widehat{Q}_i son:

$$\delta \langle \widehat{Q}_i \rangle = \frac{1}{2} Tr[\mathcal{Q}_i \delta\sigma] = \frac{i}{2} Tr[[\mathbb{R}, \mathbb{Q}_i] \mathbb{Z}] \quad (3.88)$$

La matriz \mathbb{Z} de la transformación unitaria sufre un cambio al añadir los términos de *Lagrange* al Hamiltoniano:

$$\mathbb{Z}_{\nu\mu} = i \frac{\Delta(\rho_\mu, \rho_\nu)}{E_\nu - E_\mu} \left\{ \mathbb{H}_{\nu\mu} - \sum_i \lambda_i \mathbb{Q}_{i\nu\mu} \right\} \quad (3.89)$$

Entonces para que las variaciones sean cero se tendrá que cumplir la siguiente ecuación:

ción:

$$0 = \delta \langle \hat{Q}_i \rangle = \frac{1}{2} Tr \left[[\mathbb{R}, \mathbb{Q}_i] \left(\mathbb{H}_{\nu\mu} - \sum_j \lambda_j \mathbb{Q}_{j\nu\mu} \right) \right] \frac{\Delta(\rho_\mu, \rho_\nu)}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} \quad (3.90)$$

Para resolver (3.90) es útil definir una matriz S_{ij} y un vector h_i :

$$S_{ij} = \frac{1}{2} Tr \left[[\mathbb{R}, \mathbb{Q}_i] \frac{\mathbb{Q}_{j\nu\mu}}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} \Delta(\rho_\mu, \rho_\nu) \right] = \quad (3.91)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} (\rho_\mu - \rho_\nu) \frac{\mathbb{Q}_{i\mu\nu} \mathbb{Q}_{j\nu\mu}}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} \Delta(\rho_\mu, \rho_\nu)$$

$$h_i = \frac{1}{2} Tr \left[[\mathbb{R}, \mathbb{Q}_i] \frac{\mathbb{H}_{\nu\mu}}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} \Delta(\rho_\mu, \rho_\nu) \right] = \quad (3.92)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} (\rho_\mu - \rho_\nu) \frac{\mathbb{Q}_{i\mu\nu} \mathbb{H}_{\nu\mu}}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)} \Delta(\rho_\mu, \rho_\nu)$$

donde se ha vuelto a asumir que \mathbb{R} es diagonal.

La ecuación que habrá que resolver para encontrar los multiplicadores de *Lagrange* para cada ligadura, será por tanto:

$$0 = h_i - \sum_j \lambda_j S_{ij} \Rightarrow \lambda_j = \sum_i S_{ji}^{-1} h_i \quad (3.93)$$

La matriz S_{ij} , tras descomponer la estructura de \mathbb{Q} en sus partes Q^{11} y Q^{20} y sustituir los valores de las probabilidades de ocupación f_k , es:

$$S_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\nu \neq 1} \frac{1/2}{E_\nu - E_1} Q_{i1\nu}^{11} Q_{j1\nu}^{11*} + \sum_{\mu \neq 1} \frac{-1/2}{E_1 - E_\mu} Q_{i\mu 1}^{11} Q_{j\mu 1}^{11} + \quad (3.94)$$

$$+ \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{20*} Q_{j\mu\nu}^{20}}{E_\nu + E_\mu} - \frac{Q_{i11}^{20*} Q_{j11}^{20}}{E_1 + E_1} - \frac{1}{2} \frac{Q_{i1\nu}^{20*} Q_{j1\nu}^{20}}{E_1 + E_\nu} - \frac{1}{2} \frac{Q_{i\mu 1}^{20*} Q_{j\mu 1}^{20}}{E_\mu + E_1}$$

Y dando los mismos pasos para h_i se obtiene:

$$h_i = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{(f_\mu - f_\nu)}{E_\nu - E_\mu} Q_{i\mu\nu}^{11} H_{\mu\nu}^{11*} \Delta(f_\mu, f_\nu) + \quad (3.95)$$

$$+ \frac{(1 - f_\mu - f_\nu)}{E_\nu - E_\mu} Q_{i\mu\nu}^{20*} H_{\mu\nu}^{20} \Delta(1 - f_\mu, f_\nu) + c.c.)$$

Ésta es, en resumen, la metodología que se ha llevado a cabo para implementar el cálculo y la descripción de núcleos con número impar de nucleones dentro del esquema de campo medio *HFB* con la aproximación *EFA*.

3.5. Interacciones efectivas dependientes de la densidad

En la deducción de las ecuaciones de la teoría *HFB* o las que aquí conciernen, *HFB-EFA*, no se ha nombrado nada acerca de la dependencia de la densidad en las interacciones nucleares, ya que es independiente de ello. Pero en lo que sí afecta es en las expresiones que toman las matrices de densidad ρ , κ , así como en el Hamiltoniano *HF* h , el potencial *HF* Γ , y el potencial de apareamiento Δ .

En física nuclear es habitual que las interacciones efectivas tengan una dependencia de la densidad $V(\rho)$ para incorporar el mecanismo de saturación de las fuerzas nucleares.

La densidad nuclear se define en términos de los estados de la base mediante la siguiente expresión:

$$\rho(\vec{r}) = \langle \phi | \hat{\rho} | \phi \rangle \quad \text{con} \quad \hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^A \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) = \sum_{ij} f_{ij}(\vec{r}) c_i^\dagger c_j \quad (3.96)$$

o lo que es lo mismo en espacio de coordenadas:

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{ij} \rho_{ij} \varphi_i(\vec{r}) \varphi_j^*(\vec{r}) \quad (3.97)$$

Resulta útil introducir la matriz generalizada \mathcal{F} :

$$\mathcal{F}(\vec{r}) = \begin{pmatrix} f_{ij} & 0 \\ 0 & -f_{ij}^* \end{pmatrix} \quad (3.98)$$

De manera que la densidad nuclear se puede expresar como:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu} \mathcal{R}_{\nu\mu} + \frac{1}{2} \text{Tr}(f) = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu} \sigma_{\nu\mu} = \mathcal{F} : \sigma \quad (3.99)$$

Cuando se varíe la función de onda, variará \mathcal{R} , por tanto ρ y el propio Hamiltoniano \hat{H}_{DD} . La modificación que aparecerá, por tanto, al introducir una variación en la función de onda será:

$$H_{DD}(Z) = H_{DD}(0) + \frac{\delta H_{DD}}{\delta \rho(\vec{r})} \delta \rho(\vec{r}) + \frac{1}{2} \frac{\delta^2 H_{DD}}{\delta \rho^2(\vec{r})} (\delta \rho(\vec{r}))^2 + \dots \quad (3.100)$$

con:

$$\delta\rho(\vec{R}) = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \mathcal{F}_{\mu\nu} \delta\mathcal{R}_{\nu\mu} \quad (3.101)$$

Por tanto la novedad que genera la interacción dependiente de la densidad es un término en el Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} \Delta \langle H \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \left\langle \frac{\delta H_{DD}}{\delta\rho(\vec{R})} \mathcal{F}_{\mu\nu}(\vec{R}) \right\rangle \delta\mathcal{R}_{\nu\mu} + \\ &+ \frac{1}{8} \sum_{\mu\nu\rho\sigma} \left\langle \frac{\delta^2 H_{DD}}{\delta\rho^2(\vec{R})} \mathcal{F}_{\mu\nu}(\vec{R}) \mathcal{F}_{\rho\sigma}(\vec{R}) \right\rangle \delta\mathcal{R}_{\nu\mu} \delta\mathcal{R}_{\sigma\rho} \end{aligned} \quad (3.102)$$

Se introduce la notación para la variación a primer y segundo orden $\partial^{(1)}\mathcal{H}_{\mu\nu}(Z)$ y $\partial^{(2)}\mathcal{H}_{\mu\nu\rho\sigma}(Z)$ de la siguiente forma:

$$\partial^{(1)}\mathcal{H}_{\mu\nu}(Z) = \left\langle \phi(Z) \left| \frac{\delta H_{DD}}{\delta\rho(\vec{R})} \mathcal{F}_{\mu\nu}(\vec{R}) \right| \phi(Z) \right\rangle \quad (3.103)$$

y

$$\partial^{(2)}\mathcal{H}_{\mu\nu\rho\sigma}(Z) = \left\langle \phi(Z) \left| \frac{\delta^2 H_{DD}}{\delta\rho^2(\vec{R})} \mathcal{F}_{\mu\nu}(\vec{R}) \mathcal{F}_{\rho\sigma}(\vec{R}) \right| \phi(Z) \right\rangle \quad (3.104)$$

De modo que el valor esperado de la energía será:

$$\begin{aligned} \left\langle \phi(Z) \left| \hat{H}(Z) \right| \phi(Z) \right\rangle &= \left\langle \phi(Z) \left| \hat{H}(0) \right| \phi(Z) \right\rangle + \\ &+ \partial^{(1)}\mathcal{H}(Z) : \delta\mathcal{R} + \frac{1}{2} \delta\mathcal{R} : \partial^{(2)}\mathcal{H}(0) : \delta\mathcal{R} \end{aligned} \quad (3.105)$$

En esta expresión se tendrá que tener en cuenta que:

$$\partial^{(1)}\mathcal{H}(Z) = \partial^{(1)}\mathcal{H}(0) + \bar{\partial}^{(2)}\mathcal{H}(0) : \delta\mathcal{R} \quad (3.106)$$

donde $\bar{\partial}^{(2)}\mathcal{H}(0)$ es el Hamiltoniano \mathcal{H} del operador $\frac{\delta H_{DD}}{\delta\rho(\vec{R})} \mathcal{F}_{\mu\nu}(\vec{R})$. Finalmente, la expresión de la energía queda:

$$\begin{aligned} \left\langle \phi(Z) \left| \hat{H}(Z) \right| \phi(Z) \right\rangle &= \left\langle \phi(Z) \left| \hat{H}(0) \right| \phi(Z) \right\rangle + \\ &+ \left(\mathcal{H}(0) + \partial^{(1)}\mathcal{H}(0) \right) : \delta\mathcal{R} + \frac{1}{2} \delta\mathcal{R} : \left(v + \partial^{(2)}\mathcal{H}(0) + \bar{\partial}^{(2)}\mathcal{H}(0) \right) : \delta\mathcal{R} \end{aligned} \quad (3.107)$$

en la que, además de los términos habituales, se obtienen los llamados *términos de reacoplo* $\partial^{(1)}\mathcal{H}(0)$, $\partial^{(2)}\mathcal{H}(0)$ y $\bar{\partial}^{(2)}\mathcal{H}(0)$ que aparecen al calcular la variación de la energía proyectada y considerar una dependencia explícita de la densidad.

Capítulo 4

Los Teoremas de Wick

Siempre que se utiliza el formalismo de segunda cuantización, el Teorema de Wick resulta muy útil para evaluar los promedios o los solapes de operadores fermiónicos de cuasipartículas según se trate de teorías estadísticas o de teorías a temperatura cero. La versión Estadística Extendida (TWEsEx) es la más completa, ya que permite evaluar el cálculo de los promedios estadísticos con operadores densidad que incluyen transformaciones canónicas $\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}$ [?]. A partir de esta versión se pueden deducir las otras, como son el Teorema de Wick Estadístico (TWEs) donde el promedio estadístico viene dado exclusivamente por el operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$, la versión extendida (TWEsEx) que forma parte de las utilidades de las teorías a temperatura cero, permite calcular el solape de productos de operadores de creación y destrucción entre cualquier par de funciones de onda producto no necesariamente ortogonales $|\phi\rangle$ y $|\phi'\rangle$. Por último el Teorema de Wick ordinario (TW) facilita el cálculo del valor esperado de un operador cualquiera entre el mismo estado estado $|\phi\rangle$ vacío de cuasipartículas.

El orden que se seguirá en este capítulo será, inicialmente enunciar el Teorema de Wick en su versión más completa (TWEsEx) y demostrar su validez. Como se comprobará, aunque ésta es más compleja, su demostración, debido a la propiedad cíclica de la traza, es la más sencilla. En función de los valores que tomen las probabilidades p_i de la teoría estadística o los coeficientes de la transformación canónica $\hat{\mathcal{T}}$, se van a poder deducir el resto de versiones del teorema, así como expresiones que simplifican el cálculo de elementos de matriz de operadores de cuasipartículas.

4.1. Introducción de la notación condensada

Antes de comenzar a desarrollar este capítulo resulta conveniente introducir la notación condensada [58], ya que ésta permite simplificar las expresiones que enuncian el teorema de Wick, en sus diferentes versiones, de un modo notable. El objetivo de utilizar esta notación es simplificar las expresiones que contienen operadores de partículas y cuasipartículas así como generalizar las formulas que enuncian el teorema de Wick.

Partiendo de un conjunto de operadores de creación y destrucción \bar{c}_l y c_l mediante

combinaciones lineales, se pueden definir operadores de cuasipartículas β_k y $\bar{\beta}_k$ como:

$$\bar{\beta}_k = \sum_l \{W_{lk}c_l + X_{lk}\bar{c}_l\} \quad (4.1)$$

$$\beta_k = \sum_l \{U_{lk}^*c_l + V_{lk}^*\bar{c}_l\} \quad (4.2)$$

La notación condensada permite tratar conjuntamente los operadores de destrucción y creación de partículas y cuasipartículas a través de un sólo operador. Para las cuasipartículas α_λ simboliza el conjunto de operadores de creación y destrucción:

$$\alpha_\lambda = (\beta_1, \dots, \beta_N, \bar{\beta}_1, \dots, \bar{\beta}_N) = \begin{cases} \beta_k & \text{para } \lambda = 1, \dots, N \\ \bar{\beta}_k & \text{para } \lambda = N + 1, \dots, 2N \end{cases} \quad (4.3)$$

Mientras que para los operadores de partículas se toma a_i como conjunto de c y \bar{c} :

$$a_i = (c_1, \dots, c_N, \bar{c}_1, \dots, \bar{c}_N) = \begin{cases} c_l & \text{para } i = 1, \dots, N \\ \bar{c}_l & \text{para } i = N + 1, \dots, 2N \end{cases} \quad (4.4)$$

Conviene introducir también el operador $\bar{\alpha}$ correspondiente, que como principal característica tiene el cambio de orden de los operadores β y $\bar{\beta}$:

$$\bar{\alpha}_\lambda = (\bar{\beta}_1, \dots, \bar{\beta}_N, \beta_1, \dots, \beta_N) = \begin{cases} \bar{\beta}_\lambda & \text{para } \lambda = 1, \dots, N \\ \beta_\lambda & \text{para } \lambda = N + 1, \dots, 2N \end{cases} \quad (4.5)$$

Por su parte, los operadores de partícula tendrán en \bar{a} su análogo:

$$\bar{a}_i = (\bar{c}_1, \dots, \bar{c}_N, c_1, \dots, c_N) = \begin{cases} \bar{c}_m & \text{para } i = 1, \dots, N \\ c_m & \text{para } i = N + 1, \dots, 2N \end{cases} \quad (4.6)$$

Para expresar $\bar{\alpha}$ en función de α se utiliza la matriz σ que tiene la forma:

$$\sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.7)$$

Usando esta notación condensada podemos escribir la transformación de Bogoliubov de forma compacta como:

$$\alpha_\lambda = \sum_i (W^+)_{\lambda i} a_i \quad ; \quad a_i = \sum_\lambda W_{i\lambda} \alpha_\lambda \quad (4.8)$$

$$\bar{\alpha}_\lambda = \sum_i (W^T)_{\lambda i} \bar{a}_i \quad ; \quad \bar{a}_i = \sum_\lambda (W^*)_{i\lambda} \bar{\alpha}_\lambda \quad (4.9)$$

donde la matriz W tiene la estructura:

$$W = \begin{pmatrix} U & W^* \\ V & X^* \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

Si los operadores de cuasipartícula satisfacen las relaciones de anticonmutación $\{\bar{\beta}_\lambda, \beta_\gamma\} = \delta_{\lambda\gamma}$, $\{\beta_\lambda, \beta_\gamma\} = 0$, y $\{\bar{\beta}_\lambda, \bar{\beta}_\gamma\} = 0$, entonces el nuevo conjunto de operadores de cuasipartículas α_λ satisfará la relación de anticonmutación $\{\bar{\alpha}_\lambda, \alpha_\gamma\} = \delta_{\lambda\gamma}$. En este caso los coeficientes W de la combinación lineal que define α_μ en función de a_μ van a satisfacer la relación:

$$W\sigma W^T = \sigma \quad (4.11)$$

Ésta es la única propiedad relevante de los operadores de partícula c y \bar{c} , su carácter fermiónico, pero nada hace indicar la necesidad de que entre ellos exista una relación de hermiticidad, por eso se ha considerado el caso general de c y \bar{c} . Sin embargo, para simplificar las consideraciones que se tomarán a partir de ahora, se va a asumir que el operador de partículas \bar{c}_l es el hermítico conjugado de c_l : $\bar{c}_l = c_l^\dagger$, por tanto en la notación condensada $\bar{a} = a^\dagger$. Con respecto a los operadores de cuasipartículas $\bar{\beta}_k, \beta_k$ se va a asumir que no están relacionados entre sí mediante la conjugación hermítica. Si se requiriera que los operadores $\bar{\beta}_k = \beta_k^\dagger$ fueran los hermíticos conjugados de β_k , entonces los coeficientes de la transformación que les relacionan con c_l y c_l^\dagger deberían satisfacer las condiciones $U = X$ y $V = W$. En función de los coeficientes W , esto significaría que

$$\sigma W \sigma = W^* \quad (4.12)$$

4.2. Teorema de Wick Estadístico Extendido

Partiendo de un conjunto estadístico determinado por el operador densidad $\hat{\mathcal{D}} = e^{-\hat{\mathcal{K}}}$, muchas veces se necesita evaluar el valor promedio de un operador $\hat{\mathcal{O}}$ cuando al operador densidad se le aplica una transformación canónica. Según la teoría estadística este valor se calcula a través de la traza:

$$\langle \hat{\mathcal{O}} \rangle = \frac{\text{Tr} [\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{O}}]}{\text{Tr} [\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{D}}]} \quad (4.13)$$

Gracias al teorema de Wick, es fácil calcular esta traza, sea cual sea la forma del operador $\hat{\mathcal{O}}$.

El operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$, sin particularizarlo a ningún conjunto estadístico concreto, se puede escribir como exponencial de un operador hermítico a un cuerpo [52]:

$$\hat{\mathcal{D}} = e^{-\hat{\mathcal{K}}} \quad (4.14)$$

$$\hat{\mathcal{K}} = \mathbb{K}^0 + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \mathbb{K}_{\mu\nu} \bar{\alpha}_\mu \alpha_\nu \quad (4.15)$$

donde

$$\mathbb{K} = \begin{pmatrix} \mathbb{K}^{11} & \mathbb{K}^{20} \\ -\mathbb{K}^{20*} & -\mathbb{K}^{11*} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

Por medio de estas expresiones se puede ver que existe una relación entre los operadores α y el operador de densidad que dice:

$$\alpha_\mu e^{-\hat{\mathcal{K}}} = \sum_{\nu} \left(e^{-\mathbb{K}} \right)_{\mu\nu} e^{-\hat{\mathcal{K}}} \alpha_\nu \quad (4.17)$$

Para simplificar el caso se va a trabajar en la base en la que \mathbb{K} es diagonal

$$\mathbb{K} = \begin{pmatrix} k & 0 \\ 0 & -k \end{pmatrix} \quad (4.18)$$

donde el coeficiente $p_\mu = e^{k_\mu}$ se interpreta habitualmente como una probabilidad. A partir de ahora a esta matriz se la denotará como \mathbb{M} :

$$\mathbb{M} = e^{-\mathbb{K}} = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix}_{\mu\nu} \quad (4.19)$$

Como ya se ha dicho, en el caso en que se aplica una transformación canónica a los estados de la base, el operador densidad pasa a ser $\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{D}}$. Como todas las transformaciones canónicas son unitarias, se va a considerar que $\hat{\mathcal{T}}$ es unitario para poder simplificar su expresión a una exponencial de un operador hermítico $\hat{\mathcal{Z}}$: $\hat{\mathcal{T}} = e^{-i\hat{\mathcal{Z}}}$. Esta transformación modifica las funciones de onda y los operadores de cuasipartícula de la forma:

$$|\tilde{\psi}\rangle = e^{i\hat{\mathcal{Z}}} |\psi\rangle ; \langle \tilde{\psi}| = \langle \psi| e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} \quad (4.20)$$

$$\tilde{\beta}_k = e^{i\hat{\mathcal{Z}}} \beta_k e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} = \sum_l (e^{-iZ})_{kl} \beta_l \quad (4.21)$$

Conjuntamente se observa que el efecto de la transformación es:

$$\langle \phi| \beta_k e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} = \langle \phi| e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} \tilde{\beta}_k = \langle \tilde{\phi}| \tilde{\beta}_k \quad (4.22)$$

Haciendo un inciso, se puede ver que con esta transformación $\hat{\mathcal{T}}$, el operador densidad

transformado toma la forma:

$$\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} = \frac{1}{Z} \left\{ |\phi\rangle \langle \tilde{\phi}| + \sum_{\mu} p_{\mu} \beta_{\mu}^{+} |\phi\rangle \langle \tilde{\phi}| \tilde{\beta}_{\mu} + \sum_{\mu\nu} p_{\mu} p_{\nu} \beta_{\mu}^{+} \beta_{\nu}^{+} |\phi\rangle \langle \tilde{\phi}| \tilde{\beta}_{\nu} \tilde{\beta}_{\mu} + \dots \right\} \quad (4.23)$$

Por las propiedades de la transformación $\hat{\mathcal{T}}$, la nueva relación 4.17 (4.17) entre los operadores α y el operador densidad es:

$$\alpha_{\mu} \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} = \sum_{\nu} \mathbb{M}_{\mu\nu} \hat{\mathcal{D}}\alpha_{\nu} \hat{\mathcal{T}} \equiv \sum_{\sigma} \mathcal{M}_{\mu\sigma} \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_{\sigma} \quad (4.24)$$

donde

$$\mathcal{M}_{\mu\sigma} = \sum_{\nu} \mathbb{M}_{\mu\nu} (e^{-iZ})_{\nu\sigma} = \sum_{\nu} m_{\mu} \delta_{\mu\nu} (e^{-iZ})_{\nu\sigma} \quad (4.25)$$

$$\mathbb{M} = e^{-\mathbb{K}} = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix}_{\mu\nu} \quad (4.26)$$

$$\text{y } m_{\mu} = \left(p_1, \dots, p_N, \frac{1}{p_1}, \dots, \frac{1}{p_N} \right)$$

Siempre que se cumpla (4.24), el Teorema de Wick Estadístico Extendido asegura que se puede calcular la traza de un producto de operadores de creación y destrucción genérico, como suma contracciones:

$$\frac{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \dots \alpha_j \right]}{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \right]} = \left\{ \widehat{\alpha_1 \alpha_2} \widehat{\alpha_3 \alpha_4} \dots - \widehat{\alpha_1 \alpha_3} \widehat{\alpha_2 \alpha_4} \dots + \dots \right\} \quad (4.27)$$

Las contracciones, como más adelante se demostrará, están definidas como:

$$\widehat{\alpha_{\mu} \alpha_{\nu}} = \sum_{\lambda} (\mathbb{I} + \mathcal{M})_{\mu\lambda}^{-1} \{ \alpha_{\lambda}, \alpha_{\nu} \} \quad (4.28)$$

Es aquí donde se ve la utilidad de expresar el Teorema de Wick mediante la notación condensada, por su sencillez y concreción.

Para demostrar que este modo de calcular la traza (4.27) es correcto, se van a aplicar las relaciones de conmutación de los operadores α para conmutar sucesivamente α_1 con el resto de operadores $\alpha_2, \alpha_3, \dots, \alpha_j$ hasta llevarlo a la derecha.

$$\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_j \right] = \{ \alpha_1, \alpha_2 \} \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \alpha_3 \dots \alpha_j \right] - \text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \alpha_2 \alpha_1 \dots \alpha_j \right] =$$

$$= \{\alpha_1, \alpha_2\} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] - \{\alpha_1, \alpha_3\} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_4 \cdots \alpha_j \right] + Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_3\alpha_1\alpha_4 \cdots \alpha_j \right] \quad (4.29)$$

Continuando así moviendo α_1 hacia la derecha, se encuentra como último término $(-1)^{j+1} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j\alpha_1 \right]$, que se puede reescribir usando la propiedad cíclica de la traza, junto con la condición que verifica el producto $\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}$ (4.27):

$$Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j\alpha_1 \right] = Tr \left[\alpha_1\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] = \sum_{\sigma} \mathcal{M}_{1\sigma} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_{\sigma}\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] \quad (4.30)$$

Como j es un número par, la fase $(-1)^{j+1}$ es siempre -1 , así que se podrán reagrupar los términos con j operadores α en el miembro de la izquierda y reducir su expresión a:

$$\begin{aligned} & \sum_{\sigma} (\mathbb{I} + \mathcal{M})_{1\sigma} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_{\sigma}\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] = \\ & \{\alpha_1, \alpha_2\} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] - \{\alpha_1, \alpha_3\} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_4 \cdots \alpha_j \right] + \cdots \end{aligned} \quad (4.31)$$

Al despejar la traza que se quiere evaluar y dividir todo entre $(\mathbb{I} + \mathcal{M})_{1\sigma}$ se obtiene:

$$Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] = \widehat{\alpha_1\alpha_2} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] - \widehat{\alpha_1\alpha_3} Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_4 \cdots \alpha_j \right] + \cdots \quad (4.32)$$

donde las contracciones $\widehat{\alpha_{\mu}\alpha_{\nu}}$ se definen como:

$$\widehat{\alpha_{\mu}\alpha_{\nu}} = \sum_{\sigma} (\mathbb{I} + \mathcal{M})_{\mu\sigma}^{-1} \{\alpha_{\sigma}, \alpha_{\nu}\} \quad (4.33)$$

Calculando, por el mismo método las otras trazas $Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_3 \cdots \alpha_j \right]$, $Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_2\alpha_4 \cdots \alpha_j \right]$, ... con productos de $j-1$, $j-2$, ... y 0 operadores α que aparecen en la expresión (4.32), se puede escribir la traza inicial como:

$$Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j \right] = Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \right] \left\{ \widehat{\alpha_1\alpha_2} \widehat{\alpha_3\alpha_4} \cdots - \widehat{\alpha_1\alpha_3} \widehat{\alpha_2\alpha_4} \cdots + \cdots \right\} \quad (4.34)$$

Finalmente se encuentra la expresión que se pretendía demostrar correcta, que asegura que el promedio de un producto de operadores α se puede calcular como suma de todas las combinaciones de las contracciones:

$$\frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\alpha_1\alpha_2\alpha_3 \cdots \alpha_j \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} \right]} = \left\{ \widehat{\alpha_1\alpha_2} \widehat{\alpha_3\alpha_4} \cdots - \widehat{\alpha_1\alpha_3} \widehat{\alpha_2\alpha_4} \cdots + \cdots \right\} \quad (4.35)$$

Motivado por el hecho de que ciertos límites en los valores de p_i y la transformación $\hat{\mathcal{T}}$ generan otras versiones del Teorema de Wick o permiten derivar métodos más fáciles para calcular elementos de matriz interesantes, se van a determinar expresiones más explícitas de las contracciones. La matriz de la transformación $\hat{\mathcal{T}}$ se toma de la forma:

$$e^{-iZ} \equiv \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \quad (4.36)$$

Mientras que la matriz \mathbb{M} que proviene del operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$, ya se vio que es:

$$\mathbb{M} = e^{-\mathbb{K}} = \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix}_{\mu\nu} \quad (4.37)$$

Para evitar problemas de divergencia que surgen al sustituir $p \rightarrow 0$ o $p \rightarrow \infty$, se va a reescribir la matriz de las contracciones $\mathbb{I} + \mathcal{M}$ de esta otra forma:

$$\mathbb{I} + \mathcal{M} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \frac{1}{p} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C & D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \quad (4.38)$$

Por tanto su inversa se podrá calcular fácilmente como:

$$(\mathbb{I} + \mathcal{M})^{-1} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C & D \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

A su vez esta otra expresión se puede reescribir así:

$$(\mathbb{I} + \mathcal{M})_{\mu\sigma}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} \left[\mathbb{I} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \quad (4.40)$$

Teniendo en cuenta que la matriz de la transformación $\hat{\mathcal{T}}$ es la correspondiente a una transformación canónica, satisface la propiedad $e^{-iZ} \sigma e^{-iZ^T} = \sigma$, que implica que debe cumplirse:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B^T & D^T \\ A^T & C^T \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.41)$$

De ésto se obtiene que $D^{-1}C = -C^T D^{-1T}$, y $AD^T + BC^T = 1$, lo que permite escribir parte de (4.40) como:

$$\begin{pmatrix} A & B \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C & D \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & B \\ C^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{T-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{pmatrix} \quad (4.42)$$

Todo ello hace que la matriz de las contracciones que se utilizará será:

$$\begin{aligned} \widehat{\alpha_\mu \alpha_\nu} &= \begin{pmatrix} \widehat{\beta\beta} & \widehat{\beta\bar{\beta}} \\ \widehat{\bar{\beta}\beta} & \widehat{\bar{\beta}\bar{\beta}} \end{pmatrix}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} D^T & 0 \\ C^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{T-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{pmatrix} \times \\ &\times \left[\mathbb{I} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & B \\ C^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{T-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \sigma \end{aligned} \quad (4.43)$$

Las formas explícitas de las contracciones $\widehat{\beta\beta}$, $\widehat{\beta\bar{\beta}}$, $\widehat{\bar{\beta}\beta}$ y $\widehat{\bar{\beta}\bar{\beta}}$ se incluyen en el apéndice de la base axial. Allí se desarrollarán las formas axiales de A, B y de las propias contracciones.

Ahora que ya se saben calcular los promedios del tipo (4.27), el valor promedio con un operador densidad $\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}$ de un operador cualquiera \hat{A} será:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{Tr [\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\hat{A}]}{Tr [\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}]} \quad (4.44)$$

donde

$$\begin{aligned} Tr [\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\hat{A}] &= \langle \phi | \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\hat{A} | \phi \rangle + \sum_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\hat{A}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} \langle \phi | \beta_{\mu}\beta_{\nu} \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\hat{A}\bar{\beta}_{\nu}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle \\ &= \hat{\mathcal{D}}^0 \left\{ \langle \phi | \hat{\mathcal{T}}\hat{A} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{T}}\hat{A}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} p_{\mu}p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu}\beta_{\nu} \hat{\mathcal{T}}\hat{A}\bar{\beta}_{\nu}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots \right\} \end{aligned} \quad (4.45)$$

y

$$\begin{aligned} Tr [\hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}] &= \langle \phi | \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}} | \phi \rangle + \sum_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} \langle \phi | \beta_{\mu}\beta_{\nu} \hat{\mathcal{D}}\hat{\mathcal{T}}\bar{\beta}_{\nu}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle = \\ &= \hat{\mathcal{D}}^0 \left\{ \langle \phi | \hat{\mathcal{T}} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{T}}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} p_{\mu}p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu}\beta_{\nu} \hat{\mathcal{T}}\bar{\beta}_{\nu}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots \right\} \end{aligned} \quad (4.46)$$

De manera que

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{T}}\hat{A} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{T}}\hat{A}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} p_{\mu}p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu}\beta_{\nu} \hat{\mathcal{T}}\hat{A}\bar{\beta}_{\nu}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots}{\langle \phi | \hat{\mathcal{T}} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{T}}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} p_{\mu}p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu}\beta_{\nu} \hat{\mathcal{T}}\bar{\beta}_{\nu}\bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots} \quad (4.47)$$

4.2.1. Teorema de Wick Estadístico Extendido para operadores de partículas y de cuasipartículas

Considerando el caso en el que los operadores de cuasipartículas $\bar{\beta}$ y β están relacionados mediante la hermiticidad, en este apartado se va a demostrar que la versión TWEsEx se puede aplicar tanto a operadores de cuasipartículas como a operadores de partículas con ciertas particularidades.

Para la base de cuasipartículas se ha visto que:

$$\alpha_\mu \hat{\mathcal{D}} e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} = \hat{\mathcal{D}} e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} \sum_{\sigma} \mathcal{M}_{\mu\sigma} \alpha_\sigma \quad (4.48)$$

A partir de aquí y aplicando la expresión análoga para las partículas a_i , a través de $\tilde{M}_{\mu\nu}$ se ve que:

$$a_i \hat{\mathcal{D}} e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} = \hat{\mathcal{D}} e^{-i\hat{\mathcal{Z}}} \sum_j \tilde{M}_{ij} a_j \quad (4.49)$$

También se sabe que la relación entre ambos operadores se puede expresar mediante:

$$\alpha_\mu = \mathcal{T} a_\mu \mathcal{T}^{-1} = \sum_{\rho} W_{\mu\rho}^\dagger a_\rho \quad (4.50)$$

Ésto indica que:

$$\begin{aligned} \alpha_\mu \hat{\mathcal{D}} &= \mathcal{T} a_\mu \mathcal{T}^{-1} \hat{\mathcal{D}} = \sum_{\rho} W_{\mu\rho}^\dagger a_\rho \hat{\mathcal{D}} = \\ &= \hat{\mathcal{D}} \sum_{\nu} M_{\mu\nu} \mathcal{T} a_\nu \mathcal{T}^{-1} = \sum_{\nu} M_{\mu\nu} \hat{\mathcal{D}} \sum_{\sigma} W_{\nu\sigma}^\dagger a_\sigma \end{aligned} \quad (4.51)$$

Así se va a poder extraer que:

1.

$$\mathcal{T} a_\mu \mathcal{T}^{-1} \hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}} \mathcal{T} \sum_{\nu} M_{\mu\nu} a_\nu \mathcal{T}^{-1} \quad \rightarrow \quad a_\mu \mathcal{T}^{-1} \hat{\mathcal{D}} \mathcal{T} = \mathcal{T}^{-1} \hat{\mathcal{D}} \mathcal{T} \sum_{\nu} M_{\mu\nu} a_\nu \quad (4.52)$$

2.

$$\sum_{\rho} W_{\mu\rho}^\dagger a_\rho \hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}} \sum_{\nu} M_{\mu\nu} \sum_{\sigma} W_{\nu\sigma}^\dagger a_\sigma \quad \rightarrow \quad a_\rho \hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}} \sum_{\epsilon\nu\sigma} W_{\epsilon\mu} M_{\mu\nu} W_{\nu\sigma}^\dagger a_\sigma \quad (4.53)$$

Ésto significa que:

$$a_\mu \hat{\mathcal{D}}' = \hat{\mathcal{D}}' \sum_{\nu} M_{\mu\nu} a_\nu \quad \text{donde } \hat{\mathcal{D}}' = \mathcal{T}^{-1} \hat{\mathcal{D}} \mathcal{T} \quad (4.54)$$

y

$$a_\mu \hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}} \sum_\nu \tilde{M}_{\mu\nu} a_\nu \text{ donde } \tilde{M}_{\mu\nu} = \sum_{\sigma\epsilon} W_{\mu\epsilon} M_{\epsilon\sigma} W_{\sigma\nu}^\dagger \text{ or } \tilde{M} = W M W^\dagger \quad (4.55)$$

- Base de cuasipartículas: $\alpha_\mu \hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}} \sum_\nu M_{\mu\nu} \alpha_\nu$ o $\alpha_\mu \hat{\mathcal{D}}' = \hat{\mathcal{D}}' \sum_\nu \tilde{M}_{\mu\nu} \alpha_\nu$
- Base de partículas: $a_\mu \hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}} \sum_\nu \tilde{M}_{\mu\nu} a_\nu$ o $a_\mu \hat{\mathcal{D}}' = \hat{\mathcal{D}}' \sum_\nu M_{\mu\nu} a_\nu$

Por tanto el teorema se puede aplicar tanto a cuasipartículas como a partículas, la única diferencia es que en un caso se utiliza $M_{\mu\nu}$ y en el otro la matriz transformada $\tilde{M}_{\mu\nu}$.

4.2.2. Teorema de Wick Estadístico Extendido en el límite $p \rightarrow 0$

Es fácil imaginar qué límite se encuentra cuando se sustituyen las probabilidades $p \rightarrow 0$. Si en el caso general se trata de mezclas estadísticas, en el límite que ahora se estudia se obtiene el tratamiento de estados puros.

Ahora, por tanto, se pasa a trabajar con estados $|\phi\rangle$ vacío de cuasipartículas, por lo que se sustituirá el operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$ por un estado concreto. En cuanto a la transformación $\hat{\mathcal{T}}$, se sigue considerando como un operador que realiza una transformación canónica sobre los operadores de cuasipartícula.

Este límite permitirá calcular, sencillamente, el solape de un producto de operadores de creación y destrucción de cuasipartículas entre estados vacío de cuasipartículas no ortogonales como suma de todas las posibles contracciones:

$$\begin{aligned} \lim_{p_\mu \rightarrow 0} \frac{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{T}} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_j \right]}{\text{Tr} \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{T}} \right]} &= \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{T}} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_j | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{\mathcal{T}} | \phi \rangle} = \frac{\langle \tilde{\phi} | \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_j | \phi \rangle}{\langle \tilde{\phi} | \phi \rangle} = \\ &= \{ \widehat{\alpha_1 \alpha_2} \widehat{\alpha_3 \alpha_4} \cdots - \widehat{\alpha_1 \alpha_3} \widehat{\alpha_2 \alpha_4} \cdots + \cdots \} \end{aligned} \quad (4.56)$$

En este límite se deriva la versión extendida que simplifica el cálculo del solape anterior a través de las contracciones; en este caso serán:

$$\widehat{\alpha_\mu \alpha_\nu} = \begin{pmatrix} \widehat{\beta\beta} & \widehat{\beta\beta^\dagger} \\ \widehat{\beta^\dagger\beta} & \widehat{\beta^\dagger\beta^\dagger} \end{pmatrix}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} D^T & 0 \\ C^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{T-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & -D^{-1}C \end{pmatrix} \quad (4.57)$$

donde simplemente se han sustituido por cero todos los valores de las probabilidades p_i en la expresión (4.43) y se ha vuelto a utilizar que $C^T D^{T-1} = -D^{-1}C$

Las contracciones así obtenidas coinciden con las obtenidas por otros métodos habituales [22]

4.2.3. Teorema de Wick Estadístico Extendido en el límite $[p \rightarrow \infty]$

También resulta conveniente estudiar el caso en el que ciertas probabilidades $p_{\mu_1}, \dots, p_{\mu_k}$ tienden a ∞ y el resto tienden a cero. En lo que sigue, se denominará a este límite como $[p \rightarrow \infty]$. En su forma general, el promedio en la teoría estadística extendida es:

$$\begin{aligned} & \frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{T}} \right]} = \tag{4.58} \\ & = \frac{\langle \phi | \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \sum_{\mu > \nu} p_{\mu} p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu} \beta_{\nu} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\nu} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots}{\Pi_{\mu} (1 + p_{\mu}) \langle \phi | \hat{\mathcal{T}} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{\mathcal{T}} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \sum_{\mu > \nu} p_{\mu} p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu} \beta_{\nu} \hat{\mathcal{T}} \bar{\beta}_{\nu} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots} \end{aligned}$$

Si se quiere derivar la forma resultante en este límite, hay que evaluar los órdenes en p_{μ} . La potencia mayor del denominador será $\Pi_{\mu_i=1}^k p_{\mu_i}$ o bien p^k si se escribe $p_{\mu_i} = p$, mientras que en el numerador, la potencia en p más alta será también p^k ; siendo el término que lo multiplica:

$$\langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \dots \beta_{\mu_k} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle \tag{4.59}$$

Se está suponiendo que $\mu_1 > \mu_2 > \dots > \mu_k$. Por tanto se puede decir que del límite actual, se deduce la forma del elemento de matriz:

$$\lim_{[p \rightarrow \infty]} \frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{T}} \right]} = \frac{\langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \dots \beta_{\mu_k} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle}{\langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \dots \beta_{\mu_k} \hat{\mathcal{T}} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle} \tag{4.60}$$

De acuerdo a la transformación que aplica $\hat{\mathcal{T}}$ sobre los operadores β_{μ} :

$$\langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \dots \beta_{\mu_k} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle = \langle \phi | \tilde{\beta}_{\mu_1} \tilde{\beta}_{\mu_2} \dots \tilde{\beta}_{\mu_k} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle \tag{4.61}$$

$$\langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \dots \beta_{\mu_k} \hat{\mathcal{T}} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle = \langle \phi | \tilde{\beta}_{\mu_1} \tilde{\beta}_{\mu_2} \dots \tilde{\beta}_{\mu_k} \bar{\beta}_{\mu_k} \dots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle \tag{4.62}$$

Este solape (4.61) se podrá calcular a través de las contracciones $\mathbb{C}_{\mu\nu} = \left[(\mathbb{I} + \mathcal{M})^{-1} \sigma \right]_{\mu\nu}$ en el límite $[p \rightarrow \infty]$. Para ello se va a reescribir la expresión $\mathbb{C}_{\mu\nu}$:

$$\mathbb{C}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C^T D^{T-1} & D^{T-1} \end{pmatrix} \left[\mathbb{I} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & B \\ C^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{T-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \sigma \tag{4.63}$$

Para reducir la complejidad de las expresiones se van a tomar nuevas definiciones

como:

$$\begin{pmatrix} V & W \\ X & Y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & B \\ C^T & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D^{T-1} & 0 \\ 0 & D^{-1} \end{pmatrix} \quad (4.64)$$

En el límite $[p \rightarrow \infty]$, se tendrá que la matriz $\begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V & W \\ X & Y \end{pmatrix}$ va a ser de la forma:

$$\begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V & W \\ X & Y \end{pmatrix} \simeq \begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ V_{\mu 1} & V_{\mu 2} & \cdots & V_{\mu n} & W_{\mu 1} & W_{\mu 2} & \cdots & W_{\mu n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ X_{\mu 1} & X_{\mu 2} & \cdots & X_{\mu n} & Y_{\mu 1} & Y_{\mu 2} & \cdots & Y_{\mu n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{pmatrix} \quad (4.65)$$

donde sólo sobreviven las filas correspondientes a los p_μ que tienden a infinito.

Para ser más cuantitativos habrá que introducir los vectores:

$$e_{\mu_1} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.66)$$

$$r_{\mu_1} = \begin{pmatrix} V_{\mu_1 1} \\ \vdots \\ W_{\mu_1 1} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.67)$$

$$s_{\mu_1} = \begin{pmatrix} X_{\mu_1 1} \\ \vdots \\ Y_{\mu_1 1} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad (4.68)$$

Entonces se podrá escribir la matriz anterior como:

$$\begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V & W \\ X & Y \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^k (e_{\mu_j} \otimes r_{\mu_j} + e_{\mu_j+N} \otimes s_{\mu_j}) p_{\mu_j} \quad (4.69)$$

Para la aplicación de fórmulas posteriores es más conveniente introducir las matrices

de dimensión $2N \times 2k$

$$E = (e_{\mu_1} e_{\mu_2} \cdots e_{\mu_k} e_{\mu_1+N} \cdots e_{\mu_k+N}) \quad (4.70)$$

$$R = (r_{\mu_1} r_{\mu_2} \cdots r_{\mu_k} s_{\mu_1+N} \cdots s_{\mu_k+N}) \quad (4.71)$$

y asumir que $p_{\mu_1} = p_{\mu_2} = \cdots = p_{\mu_k} = p$

De tal forma que se va a poder escribir:

$$\begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} V & W \\ X & Y \end{pmatrix} = pER^T \quad (4.72)$$

Así se puede usar la fórmula de Woodbury [59] para calcular la matriz inversa que interesa

$$(\mathbb{I} + pER^T)^{-1} = \mathbb{I} - pE(1 + pR^TE)^{-1}R^T \quad (4.73)$$

donde la nueva matriz inversa a calcular $(1 + pR^TE)^{-1}$ corresponde a una matriz $2k \times 2k$

En el límite $[p \rightarrow \infty]$ se puede escribir

$$\begin{aligned} (1 + pR^TE)^{-1} &= \frac{1}{p} (R^TE)^{-1} \left(1 + \frac{1}{p} (R^TE)^{-1}\right)^{-1} = \\ &= \frac{1}{p} (R^TE)^{-1} - \frac{1}{p^2} (R^TE)^{-1} (R^TE)^{-1} + \dots \end{aligned} \quad (4.74)$$

De forma que

$$(\mathbb{I} + pER^T)^{-1} = \mathbb{I} - E(R^TE)^{-1}R^T + \frac{1}{p}E(R^TE)^{-2}R^T + \dots \quad (4.75)$$

Cuando algún valor de la probabilidad p toma el valor ∞ , se plantea el problema de la divergencia, ya que hay que multiplicar por $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix}$ y el límite, aparentemente diverge. Para tratar este caso, se va a tener en cuenta que:

$$= \left(\mathbb{I} - E(R^T E)^{-1} R^T \right) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + E(R^T E)^{-1} E^T \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Definiendo la matriz \tilde{R}^T tal que:

$$\tilde{R}^T = -R^T \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + E^T \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (4.81)$$

entonces

$$\lim_{p \rightarrow \infty} (\mathbb{I} + pER^T)^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + E(R^T E)^{-1} \tilde{R}^T \quad (4.82)$$

Así que la contracción es este límite será:

$$\mathbb{C}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ C^T D^{T-1} & D^{T-1} \end{pmatrix} \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + E(R^T E)^{-1} \tilde{R}^T \right] \sigma \quad (4.83)$$

4.3. Teorema de Wick Estadístico

El Teorema de Wick Estadístico (TWEs) se puede extraer del teorema completo, tomando la transformación $\hat{\mathcal{T}}$ como la identidad. De forma que mediante este teorema se deduce el valor esperado de un producto de operadores de creación y destrucción de cuasipartículas $Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \alpha_{\mu_1} \alpha_{\mu_2} \cdots \alpha_{\mu_j} \right]$.

El operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$ mantiene su forma genérica:

$$\hat{\mathcal{D}} = e^{-\hat{\mathcal{K}}} = \frac{1}{Z} \left\{ |\phi\rangle \langle \phi| + \sum_{\mu} p_{\mu} \bar{\beta}_{\mu} |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\mu} + \sum_{\mu\nu} p_{\mu} p_{\nu} \bar{\beta}_{\mu} \bar{\beta}_{\nu} |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\nu} \beta_{\mu} + \cdots \right\} \quad (4.84)$$

donde $|\phi\rangle$ representa todos los elementos del espacio de Hilbert, es decir, todos los estados con cualquier número de cuasipartículas, incluyendo el vacío.

Gracias al TWEs el solape de productos de operadores α se va a poder calcular como suma de las contracciones:

$$\frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_j \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \right]} = \{ \widehat{\alpha_1 \alpha_2} \widehat{\alpha_3 \alpha_4} \cdots - \widehat{\alpha_1 \alpha_3} \widehat{\alpha_2 \alpha_4} \cdots + \cdots \} \quad (4.85)$$

donde las contracciones son:

$$\widehat{\alpha_\mu \alpha_\nu} = \begin{pmatrix} \widehat{\beta\beta} & \widehat{\beta\bar{\beta}} \\ \widehat{\bar{\beta}\beta} & \widehat{\bar{\beta}\bar{\beta}} \end{pmatrix}_{\mu\nu} = \left[\mathbb{I} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \right]^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \sigma \quad (4.86)$$

Si se traslada este cálculo a la forma concreta de un operador \hat{A} , entonces se tendrá:

$$\langle \hat{A} \rangle = \frac{Tr [\hat{D}\hat{A}]}{Tr [\hat{D}]} \quad (4.87)$$

donde

$$Tr [\hat{D}\hat{A}] = \langle \phi | \hat{D}\hat{A} | \phi \rangle + \sum_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{D} \hat{A} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} \langle \phi | \beta_{\mu} \beta_{\nu} \hat{D} \hat{A} \bar{\beta}_{\nu} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle \quad (4.88)$$

Usando que

$$\beta_{\mu} \hat{D} = p_{\mu} \hat{D} \beta_{\mu} \text{ y } \langle \phi | \hat{D} = \mathcal{D}^0 \langle \phi | \quad (4.89)$$

$$Tr [\hat{D}\hat{A}] = \mathcal{D}^0 \left\{ \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{A} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} p_{\mu} p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu} \beta_{\nu} \hat{A} \bar{\beta}_{\nu} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle \right\} \quad (4.90)$$

Y la traza del mismo operador densidad es:

$$\begin{aligned} Tr [\hat{D}] &= \mathcal{D}^0 \left\{ 1 + \sum_{\mu} p_{\mu} + \frac{1}{2!} \sum_{\mu\nu} p_{\mu} p_{\nu} (1 - \delta_{\mu\nu}) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{3!} \sum_{\mu\nu\rho} p_{\mu} p_{\nu} p_{\rho} (1 - \delta_{\mu\nu} - \delta_{\rho\nu} - \delta_{\rho\mu} + 2\delta_{\mu\rho} \delta_{\mu\nu}) + \dots \right\} = \\ &= \mathcal{D}^0 \left\{ 1 + \sum_{\mu} p_{\mu} + \sum_{\mu>\nu} p_{\mu} p_{\nu} + \sum_{\mu>\nu>\rho} p_{\mu} p_{\nu} p_{\rho} + \dots \right\} = \\ &= \mathcal{D}^0 \Pi_{\mu} (1 + p_{\mu}) \end{aligned} \quad (4.91)$$

Finalmente el cálculo queda:

$$\frac{Tr [\hat{D}\hat{A}]}{Tr [\hat{D}]} = \frac{1}{\Pi_{\mu} (1 + p_{\mu})} \left\{ \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle + \sum_{\mu} p_{\mu} \langle \phi | \beta_{\mu} \hat{A} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \sum_{\mu>\nu} p_{\mu} p_{\nu} \langle \phi | \beta_{\mu} \beta_{\nu} \hat{A} \bar{\beta}_{\nu} \bar{\beta}_{\mu} | \phi \rangle + \dots \right\} \quad (4.92)$$

4.3.1. Teorema de Wick Estadístico en el límite $[p \rightarrow 0]$

Es inmediato reconocer este límite como el teorema ordinario que se utiliza en teorías a temperatura cero, con el que se puede calcular el valor esperado de un producto de operadores de creación y destrucción de cuasipartículas. Esta es la versión del Teorema de Wick que normalmente se utiliza en la teoría HFB para calcular los elementos de matriz del Hamiltoniano [22]. Como ya se ha venido viendo, se puede enunciar por medio de la siguiente expresión:

$$\frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_j \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \right]} = \langle \phi | \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \cdots \alpha_j | \phi \rangle = \{ \widehat{\alpha_1 \alpha_2} \widehat{\alpha_3 \alpha_4} \cdots - \widehat{\alpha_1 \alpha_3} \widehat{\alpha_2 \alpha_4} \cdots + \cdots \} \quad (4.93)$$

siendo las contracciones :

$$\widehat{\alpha_\mu \alpha_\nu} = \begin{pmatrix} \widehat{\beta \beta} & \widehat{\beta \bar{\beta}} \\ \widehat{\bar{\beta} \beta} & \widehat{\bar{\beta} \bar{\beta}} \end{pmatrix}_{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \sigma = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (4.94)$$

Esto quiere decir que sólo la contracción $\widehat{\beta \bar{\beta}}$ es no nula, como cabe esperar de los operadores de cuasipartícula β y $\bar{\beta}$ y de los estados $|\phi\rangle$ vacíos de cuasipartícula.

Para un operador cualquiera \hat{A} , este método simplifica el calculo del solape:

$$\lim_{p_\mu \rightarrow 0} \frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{A} \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \right]} = \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle \quad (4.95)$$

4.3.2. Teorema de Wick estadístico en el límite $[p \rightarrow \infty]$

Como en el apartado anterior, resulta conveniente estudiar el caso en que ciertas probabilidades $p_{\mu_1}, \dots, p_{\mu_k} \rightarrow \infty$ y el resto tienden a cero, es decir, el límite que se ha denominado $[p \rightarrow \infty]$. Antes de evaluar el límite se tiene una expresión general:

$$\frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{A} \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \right]} = \frac{1}{\prod_\mu (1 + p_\mu)} \left\{ \langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle + \sum_\mu p_\mu \langle \phi | \beta_\mu \hat{A} \bar{\beta}_\mu | \phi \rangle + \sum_{\mu > \nu} p_\mu p_\nu \langle \phi | \beta_\mu \beta_\nu \hat{A} \bar{\beta}_\nu \bar{\beta}_\mu | \phi \rangle + \cdots \right\} \quad (4.96)$$

De manera análoga a como se hizo para el apartado 4.2.3, tras estudiar las potencias en las probabilidades p_{μ_i} , se deduce que en el límite $[p \rightarrow \infty]$ el término al que da lugar es:

$$\langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \cdots \beta_{\mu_k} \hat{A} \bar{\beta}_{\mu_k} \cdots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle \quad (4.97)$$

Por tanto

$$\lim_{[p \rightarrow \infty]} \frac{\text{Tr} [\hat{\mathcal{D}} \hat{\mathcal{A}}]}{\text{Tr} [\hat{\mathcal{D}}]} = \langle \phi | \beta_{\mu_1} \beta_{\mu_2} \cdots \beta_{\mu_k} \hat{\mathcal{A}} \bar{\beta}_{\mu_k} \cdots \bar{\beta}_{\mu_2} \bar{\beta}_{\mu_1} | \phi \rangle \quad (4.98)$$

La forma más sencilla de obtener la matriz de las contracciones en este límite, es partir de la expresión obtenida en el límite $[p \rightarrow \infty]$ del TWESEx y sustituir por la identidad la transformación \tilde{T} . Se esta sencilla manera se llega a:

$$\mathbb{C}_{\mu\nu} = \left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} + E (R^T E)^{-1} \tilde{R}^T \right] \sigma \quad (4.99)$$

donde E y R están definidas de la misma manera que en la sección 4.2.3.

Con este caso se concluye el repaso por todas las versiones del Teorema de Wick que interesan para evaluar los valores esperados o valores promedios de la Teoría HFB tanto en temperatura cero, como en temperatura finita.

Capítulo 5

Técnicas de mejora y extensiones de la teoría HFB

En la descripción teórica a nivel microscópico que se hace del núcleo, la teoría HFB juega un papel muy importante debido a su grado de acuerdo con los datos experimentales. Pero no se pueden decir sólo halagos de esta teoría, ya que también tiene deficiencias e inconvenientes que deben ser subsanados. En concreto hay propiedades como ciertos estados excitados de los espectros que no se consiguen reproducir correctamente a nivel de campo medio. Por este motivo se introducen nuevos procedimientos o técnicas que, bajo la misma suposición de simplicidad, intentan completar la descripción a través de nuevas correlaciones en las funciones de onda. Ésto se lleva a cabo mediante las técnicas de proyección que simultáneamente restauran simetrías en las funciones de onda y añaden mayor complejidad incluyendo más correlaciones a la funciones de onda [22].

Por otro lado, y basado en el éxito de los modelos colectivos tales como el modelo de la gota líquida, etc para reproducir propiedades nucleares, se pretende encontrar un modelo colectivo que tenga como fundamento la teoría microscópica. Ésto permite tratar al núcleo como un ente colectivo donde las variables colectivas gobiernan las propiedades del núcleo tanto en el estado fundamental como en los estados excitados. Ésto es lo que se pretende hacer al utilizar la aproximación adiabática de la teoría HFB dependiente del tiempo. Mediante esta aproximación y utilizando una interpretación clásica, se deduce el Hamiltoniano colectivo. En concreto resulta de utilidad este Hamiltoniano, porque permite estimar las masas colectivas. El objetivo que se pretende con esta estimación es estudiar, para los procesos de fisión, cuál es el valor de la semivida de la fisión espontánea.

En este capítulo se va a desarrollar la técnica de la proyección para recuperar la paridad y la paridad de número y por otro lado se va a estudiar la aproximación adiabática para deducir las expresiones de las masas colectivas en la aproximación EFA de la teoría microscópica HFB que permiten evaluar a través de la aproximación WKB la semivida de fisión espontánea.

5.1. Restauración de Simetrías. Técnicas de proyección

De acuerdo con la forma que tiene, el Hamiltoniano exacto de muchos cuerpos es invariante bajo ciertas simetrías \hat{S} , lo que quiere decir que siempre se pueden encontrar funciones de onda que son autoestados de \hat{H} y \hat{S} simultáneamente.

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad (5.1)$$

Ejemplos de estas simetrías son el número de partículas \hat{N} , la paridad $\hat{\Pi}$, los operadores de momento angular \hat{J}^2 , \hat{J}_z , etc. La ventaja de poseer estas simetrías es que permiten tener números cuánticos para etiquetar las autofunciones del Hamiltoniano, permitiendo trabajar en los subespacios de los operadores de simetría.

Sin embargo el problema surge cuando se pretende describir sistemas de muchos cuerpos con fuertes correlaciones que rompen esas simetrías. Como las correlaciones conllevan un grado de complejidad en las funciones de onda, hay que llegar a un acuerdo entre la sencillez de las funciones de onda y el grado de descripción de las correlaciones.

Como procedimiento generalizado en la física nuclear se suele usar la aproximación de campo medio que toma funciones de onda producto de funciones de onda individuales, pero con ruptura de simetrías para que se puedan incluir correlaciones. Dependiendo de la naturaleza de las correlaciones que se quieran incluir, esta aproximación será más o menos apropiada. Por ejemplo correlaciones del tipo partícula-agujero de largo alcance o partícula-partícula de corto alcance están incluidas dentro del campo medio, y ello provoca que en la teoría HFB y por extensión también en la EFA, tanto el número de partículas como el momento angular en núcleos deformados dejen de ser simetrías. También hay núcleos en los que la inclusión de correlaciones octupolares aporta mínimos de la energía del estado fundamental más profundos; el inconveniente es que se pierde la simetría bajo reflexión espacial. Por otro lado, en lo que compete a la EFA tampoco la paridad de número es simetría del sistema, aunque sí lo es en la teoría HFB. Según la expresión del operador densidad de la EFA:

$$\hat{D}_{EFA} = \frac{1}{4} \{ |\phi\rangle \langle\phi| + \beta_\mu^+ |\phi\rangle \langle\phi| \beta_\mu + \beta_{\bar{\mu}}^+ |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}} + \beta_\mu^+ \beta_{\bar{\mu}}^+ |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}} \beta_\mu \} \quad (5.2)$$

existe una mezcla de estados de paridad de número par ($|\phi\rangle \langle\phi|$ y $\beta_\mu^+ \beta_{\bar{\mu}}^+ |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}} \beta_\mu$) con otros de paridad de número impar ($\beta_\mu^+ |\phi\rangle \langle\phi| \beta_\mu$ y $\beta_{\bar{\mu}}^+ |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}}$).

Para ciertas simetrías, como el número de partículas o el momento angular existen técnicas que permiten su recuperación aproximada. Como ya se vio en el capítulo 2, las ligaduras del Hamiltoniano posibilitan una descripción aproximada del sistema con el número correcto de partículas o del momento angular J_x en promedio. Aún así existen motivos más que suficientes para defender la restauración exacta de las simetrías perdidas a nivel de campo medio y que tiene que ver con el carácter cuántico del núcleo atómico. Mientras que para ciertas cantidades macroscópicas como el radio, la deformación, la energía del

estado fundamental, etc. la aproximación de campo medio proporciona buenos resultados, para cantidades de naturaleza cuántica como los espectros discretos o las transiciones entre estados excitados, el campo medio no es un buen modelo.

Las funciones de onda que rompen simetrías han sido interpretadas como funciones de onda en un sistema de coordenadas intrínseco moviéndose con el núcleo. Mediante técnicas de proyección para restaurar las simetrías se consigue pasar del sistema intrínseco al sistema del laboratorio y obtener así, funciones de onda colectivas.

Debido a las fluctuaciones cuánticas, las funciones de onda del sistema de laboratorio pueden tener deformación octupolar y buena paridad a la vez. Lo mismo pasa cuando experimentalmente se encuentra que núcleos con estado fundamental 0^+ presentan bandas rotacionales. Cuánticamente una distribución esférica no puede rotar, sólo una deformada. Las bandas rotacionales indican que el núcleo está deformado, pero la simetría de una función de onda 0^+ es esférica. Ambos hechos se unifican mediante el principio de indeterminación de Heisenberg: el objeto fluctúa cuanticamente tan rápido que dichas fluctuaciones hacen que se vea con simetría esférica.

El espacio variacional generado por las funciones de onda proyectadas es mayor que aquel generado únicamente por las funciones de onda tipo producto. Al proyectar o hacer aplicar el Método de la Coordenada Generadora (GCM) se amplía el espacio variacional, ya que no sólo se podrán tener funciones de onda producto, sino combinaciones de estos productos que acarrearán más correlaciones. De esta forma la energía obtenida por el principio variacional es menor al ser mayor el número de funciones de onda del espacio variacional.

Métodos de aplicación de la proyección

Aunque el marco de la EFA es la teoría estadística, para analizar la técnicas de proyección se va a utilizar la teoría a temperatura cero. Posteriormente la extensión a temperatura finita se obtendrá simplemente trasladando el papel que desempeña la función de onda intrínseca $|\phi\rangle$ al operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$.

El concepto básico que soporta la técnica de la proyección es la diagonalización del Hamiltoniano completo de muchos cuerpos en el subespacio colectivo generado por un conjunto de funciones $|\Phi\rangle$ autoestados de las simetrías que se restauran.

Existen dos maneras de proceder con la proyección: proyectar después de haber encontrado las funciones de onda intrínsecas (PAV: Projection After Variation) o variar cada una de las funciones intrínsecas proyectadas hasta encontrar la solución autoconsistente (VAP: Variation After Projection). El caso más sencillo consiste en determinar la función de onda de campo medio $|\phi\rangle$ mediante la minimización de la energía intrínseca:

$$\delta \frac{\langle \phi | H | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} = 0 \quad (5.3)$$

donde $|\phi\rangle$ es una superposición de autoestados del operador de simetría correspondiente. A continuación se aplica el operador de proyección sobre la función de onda intrínseca recién obtenida:

$$|\Psi^S\rangle = \hat{P}^S |\phi\rangle \quad (5.4)$$

$|\Psi^S\rangle$ ya no es una función de onda tipo producto, sino una superposición de funciones de onda de tipo producto que sólo contiene componentes con el valor adecuado de la simetría que se busca. Por eso ahora $|\Psi^S\rangle$ contiene muchas más correlaciones que inducen a un mínimo en la energía más profundo y a una mejor aproximación de la función de onda exacta del sistema. La inconsistencia de este método es que no cumple el principio variacional, ya que no se varía la función proyectada $|\Psi^S\rangle$ para permitir cambios en el campo intrínseco auto-consistente.

La mejora de este procedimiento, por tanto, es aplicar el principio variacional para minimizar el valor esperado de la energía proyectada en el subespacio de las autofunciones de la simetría \hat{S} :

$$\delta \frac{\langle \Psi^S | H | \Psi^S \rangle}{\langle \Psi^S | \Psi^S \rangle} = \delta \frac{\langle \Phi | \hat{P}^S H \hat{P}^S | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \hat{P}^S \hat{P}^S | \Phi \rangle} = 0 \quad (5.5)$$

Este método es más completo pero también es mucho más complicado, puesto que tras cada proyección hay que aplicar la variación.

Procedimiento intermedio de proyección: PAV con ligaduras

Aunque se ha dicho que sólo hay dos modos para aplicar la técnica de la proyección, existe una tercera estrategia que posee a la vez las ventajas de los dos procedimientos anteriores. El problema que posee el método PAV es que no cumple un tratamiento auto-consistente, de modo que no se puede asegurar que tras la proyección de la solución de campo medio se encuentre la configuración de menor energía y con la simetría requerida restaurada.

La mayor o menor ruptura de las simetrías se puede evaluar en función de ciertas coordenadas colectiva. Por ejemplo con el momento cuadrupolar Q_{20} se puede graduar el grado de ruptura de la simetría rotacional, con el momento octupolar Q_{30} se evalúa la ruptura de paridad y con la indeterminación en el número de partículas ΔN^2 se puede medir cuan rota está la simetría del número de partículas.

Para analizar si realmente el valor de la coordenada colectiva (Q_{20} , Q_{30} , ΔN^2 , etc.) que da menor energía es el mismo para los resultados de campo medio y para los proyectados, se suele acudir a la técnica PAV con ligaduras. Para ello se realiza una serie de cálculos de campo medio construyendo a diferentes valores de la variable colectiva que rompe la simetría, para luego proyectar cada uno de esos casos. Así se puede analizar si tras la proyección hay algún otro estado, diferente al mínimo de campo medio, que posee una energía del estado fundamental más baja. Eso significaría que la autoconsistencia de la proyección exacta VAP provoca un cambio en los parámetros colectivos. El estudio de los resultados proyectados en función de esta coordenada generadora permite encontrar la configuración de menor energía.

Operadores de proyección

Pasando ya a los casos específicos de proyección que interesa tratar en este trabajo, se van a ver los operadores de proyección que restauran la simetría de paridad y la simetría de paridad de número.

El operador de proyección a buena paridad tiene la forma:

$$\hat{P}_\pi = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + \pi \hat{\Pi}) \quad \text{donde } \pi = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases} \quad (5.6)$$

siendo $\hat{\Pi}$ el operador de paridad estándar. Su representación usando el formalismo de segunda cuantización está dado por:

$$\hat{\Pi} = e^{i\pi \sum_{k-} c_k^+ c_k} \quad (5.7)$$

donde c_k^+ , c_k son los operadores que crean y destruyen, respectivamente, partículas en estados $|k\rangle$ con buena paridad. La suma sobre $k-$ está restringida a estados de partícula con paridad negativa.

El operador de paridad $\hat{\Pi}$ cumple:

$$\hat{\Pi}^2 = 1 \quad \text{y} \quad \hat{\Pi}^\dagger = \hat{\Pi} \quad (5.8)$$

El operador número de partículas $\sum_{k-} c_k^+ c_k$ contabiliza el número de estados con paridad negativa. Así:

$$c_k^+ c_k = \begin{cases} +1 & \text{si el estado } k \text{ es de paridad negativa} \\ 0 & \text{si el estado } k \text{ es de paridad positiva} \end{cases} \quad (5.9)$$

Por tanto la exponencial $e^{i\pi \sum_{k-} c_k^+ c_k}$ es $+1$ si el número de niveles con paridad negativa es par y -1 si hay un número impar de estados con paridad negativa. Ésto es lo que nos dice el operador paridad, de forma que se ha deducido la expresión (5.7).

Ahora se va a demostrar que (5.6) es el operador que realiza la operación de proyección sobre estados de paridad definida. Cualquier función de onda que no tenga buena paridad, se puede descomponer como suma de una parte de paridad positiva más otra de paridad negativa:

$$|\phi\rangle = |\phi_+\rangle + |\phi_-\rangle \quad (5.10)$$

Cada una de esta dos partes se puede encontrar así:

$$|\phi_+\rangle = \frac{1}{2} (|\phi\rangle + \hat{\Pi} |\phi\rangle) \quad (5.11)$$

y

$$|\phi_{-}\rangle = \frac{1}{2} (|\phi\rangle - \hat{\Pi}|\phi\rangle) \quad (5.12)$$

Así al aplicar el proyector \hat{P}_{π} sobre la función de onda con ruptura de paridad, se tendrá:

$$\hat{P}_{\pi}|\phi\rangle = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + \pi\hat{\Pi}) (|\phi_{+}\rangle + |\phi_{-}\rangle) = \frac{1}{2} (|\phi_{+}\rangle + |\phi_{-}\rangle + \pi (|\phi_{+}\rangle - |\phi_{-}\rangle)) \quad (5.13)$$

Si se proyecta sobre paridad positiva, $\pi = +1$ y el resultado final es:

$$\hat{P}_{\pi=+1}|\phi\rangle = |\phi_{+}\rangle \quad (5.14)$$

Mientras que si se proyecta a paridad negativa, $\pi = -1$ y se obtiene:

$$\hat{P}_{\pi=-1}|\phi\rangle = |\phi_{-}\rangle \quad (5.15)$$

que son los dos resultados que se esperaba obtener.

Usando estas propiedades se puede demostrar que el operador \hat{P}_{π} verifica las características de un proyector:

$$\hat{P}_{\pi}^+ = \hat{P}_{\pi} \text{ y } \hat{P}_{\pi}^2 = \hat{P}_{\pi} \quad (5.16)$$

Por otro lado el proyector de paridad de número posee una forma muy parecida a \hat{P}_{π} :

$$\hat{P}_p = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + pe^{i\pi\hat{N}}) = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + pe^{i\pi\sum_k c_k^+ c_k}) \quad (5.17)$$

donde $p = \begin{cases} +1 \\ -1 \end{cases}$ según se proyecte a paridad de número par o impar.

Para demostrar que el proyector (5.17) es el operador que proyecta a estados con paridad de número definida, primero se va a estudiar el operador paridad de número, análogamente a como se vio en el caso de la paridad.

El operador número de partículas $\hat{N} = \sum_k c_k^+ c_k$ contabiliza el número de estados k ocupados. Por tanto la exponencial $e^{i\pi\sum_k c_k^+ c_k}$ es $+1$ si hay un número par de estados ocupados y -1 si hay un número impar de estados ocupados. Así se puede llamar al operador $e^{i\pi\hat{N}}$, el operador paridad de número.

Partiendo de una función de onda que tienen mezcla de paridad de número:

$$|\phi\rangle = |\phi_{p=+}\rangle + |\phi_{p=-}\rangle \quad (5.18)$$

donde cada una de estas partes está dada por:

$$|\phi_{+}\rangle = \frac{1}{2} \left(|\phi\rangle + e^{i\pi\hat{N}} |\phi\rangle \right) \quad (5.19)$$

y

$$|\phi_{-}\rangle = \frac{1}{2} \left(|\phi\rangle - e^{i\pi\hat{N}} |\phi\rangle \right) \quad (5.20)$$

se puede observar que el efecto de aplicar el proyector \hat{P}_p sobre la función de onda con mezcla de paridad de número es el deseado:

$$\hat{P}_p |\phi\rangle = \frac{1}{2} \left(\mathbb{I} + p e^{i\pi\hat{N}} \right) (|\phi_{p=+}\rangle + |\phi_{p=-}\rangle) = \frac{1}{2} (|\phi_{p=+}\rangle + |\phi_{p=-}\rangle + p(|\phi_{p=+}\rangle - |\phi_{p=-}\rangle)) \quad (5.21)$$

Al proyectar sobre paridad de número positiva $p = +1$, sólo queda la parte positiva, mientras que si se proyecta a paridad de número negativa, $p = -1$ sólo queda la parte negativa:

$$\hat{P}_{p=+} |\phi\rangle = |\phi_{p=+}\rangle \quad (5.22)$$

$$\hat{P}_{p=-} |\phi\rangle = |\phi_{p=-}\rangle \quad (5.23)$$

que son los dos resultados que se esperaba obtener.

Tanto el operador de paridad como el operador de paridad de número no generan un transformación canónica en su conjunto, pero sí sus dos sumandos \mathbb{I} y $\hat{\Pi}$ para paridad o $e^{i\pi\hat{N}}$ para paridad de número. Este hecho es importante, como ya se vio en el capítulo anterior, para poder aplicar el Teorema de Wick al cálculo de valores esperados.

Técnicas de proyección con Temperatura Finita

El espacio de Hilbert de los estados proyectados se podrá escribir como el conjunto de funciones de onda proyectadas:

$$|\Psi^S\rangle = \hat{P}^S |\phi\rangle \quad (5.24)$$

Como ya se vio en el capítulo 3, en la teoría con temperatura finita el valor esperado de cualquier operador se calcula a través del operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$. Por tanto si ahora se

pretende hacer uso del tratamiento de proyección se tendrá que trabajar con el operador densidad proyectado [51]:

$$\hat{\mathcal{D}}^p = \sum_i p_i |\Psi_i^S\rangle \langle \Psi_i^S| = \sum_i p_i \hat{P}^S |\phi_i\rangle \langle \phi_i| \hat{P}^S = \frac{1}{Z^p} \hat{P}^S \hat{\mathcal{D}} \hat{P}^S \quad (5.25)$$

$$\hat{\mathcal{D}}^p = \frac{1}{Z^p} \left\{ \hat{P}^S |\phi\rangle \langle \phi| \hat{P}^S + \sum_{\mu} p_{\mu} \hat{P}^S \beta_{\mu}^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\mu} \hat{P}^S + \sum_{\mu\nu} p_{\mu} p_{\nu} \hat{P}^S \beta_{\mu}^+ \beta_{\nu}^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\nu} \beta_{\mu} \hat{P}^S + \dots \right\} \quad (5.26)$$

donde Z^p es la función de partición proyectada:

$$Z^p = Tr \left[\hat{\mathcal{D}}^p \right] \quad (5.27)$$

Debido a la similitud en la forma de los operadores de proyección de paridad y de paridad de número, por simplicidad en el desarrollo que se va a llevar a cabo para obtener las expresiones de la matriz densidad y tensor de apareamiento proyectados, se va a tomar la proyección de la paridad. Posteriormente las expresiones de ρ y κ para la proyección de la paridad de número, se obtendrán cambiando el operador $\hat{\Pi}$ por el de paridad de número $e^{i\pi\hat{N}}$ en las expresiones finales.

Un operador a un cuerpo en el formalismo de segunda cuantización se expresa como:

$$\hat{O} = \sum_{ij} O_{ij} c_i^{\dagger} c_j \quad (5.28)$$

Desgranando la expresión del promedio estadístico del operador \hat{O} y suponiendo que es de paridad positiva, en función de los componentes del operador de proyección:

$$\langle \hat{O} \rangle = \frac{Tr \left[\hat{P} \hat{\mathcal{D}} \hat{P} \hat{O} \right]}{Tr \left[\hat{P} \hat{\mathcal{D}} \hat{P} \right]} = \frac{Tr \left[\hat{P} \hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right]}{Tr \left[\hat{P} \hat{\mathcal{D}} \right]} = \frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right] + \pi Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \right] + \pi Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} \quad (5.29)$$

En la segunda igualdad se ha tenido en cuenta que el operador de proyección conmuta con el operador \hat{O} por ser éste de paridad positiva. Además se ha aplicado la propiedad del proyector de paridad $\hat{P}^2 = \hat{P}$.

Se distinguen dos contribuciones; la primera $Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right]$ que es exactamente igual al valor promedio en la aproximación EFA y la segunda contribución $Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right]$, que es la novedad que aporta la teoría estadística proyectada. Para cada uno de estos dos bloques resulta conveniente definir las matrices densidad ρ y κ . A la primera parte $Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right]$, se le asocia la matriz densidad $\rho_{ij}^0 = \frac{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} c_j^{\dagger} c_i \right]}{Tr \left[\hat{\mathcal{D}} \right]}$ que es exactamente ρ^{EFA} ; mientras que para la segunda parte $Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \hat{O} \right]$ se define la matriz densidad $\rho_{ij}^{\pi} = \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_j^{\dagger} c_i \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]}$. De igual forma se

calcula el tensor de apareamiento. De ésto se deduce que el operador densidad proyectado, $\rho_{ij}^P = Tr \left[\hat{P} \hat{\mathcal{D}} c_j^\dagger c_i \right]$, no se puede factorizar en una parte de campo medio y otra con el operador paridad, sino que se debe separar en dos partes bien diferenciadas.

Como ya se vio en el capítulo anterior, la única condición que se debe verificar en la traza $Tr \left[\hat{T} \hat{\mathcal{D}} \alpha_{\mu_1} \alpha_{\mu_2} \alpha_{\mu_3} \cdots \alpha_{\mu_j} \right]$ para que el teorema de Wick pueda ser aplicado es que el operador \hat{T} genérico debe generar una transformación canónica. En el caso de las proyecciones (5.6) y (5.17) el papel de \hat{T} lo realizan $\hat{\Pi}$ y $e^{i\pi \hat{N}}$ que sí que engendran sendas transformaciones canónicas. Hay que hacer notar la necesidad de tener esta separación en las dos contribuciones, ya que los operadores de proyección \hat{P} completos no cumplen la condición del teorema de Wick, aunque sí sus partes integrantes.

Las expresiones de la matriz densidad ρ y de los tensores de apareamiento κ y $\bar{\kappa}$ serán los siguientes:

$$\rho_{ij}^\pi = \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_j^\dagger c_i \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} \quad (5.30)$$

El producto de operadores de partícula $c_j^\dagger c_i$ se expresa en función de los operadores de cuasipartículas como:

$$c_j^\dagger c_i = \sum_{kl} \left\{ U_{jk}^* V_{il}^* \beta_k^\dagger \beta_l^\dagger + V_{jk} V_{il}^* \beta_k \beta_l^\dagger + U_{jk}^* U_{il} \beta_k^\dagger \beta_l + V_{jk} U_{il} \beta_k \beta_l \right\} \quad (5.31)$$

Por tanto la matriz densidad tendrá la expresión:

$$\begin{aligned} \rho_{ij}^\pi = \sum_{kl} \left\{ U_{jk}^* V_{il}^* \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k^\dagger \beta_l^\dagger \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} + V_{jk} V_{il}^* \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k \beta_l^\dagger \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} + \right. \\ \left. + U_{jk}^* U_{il} \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k^\dagger \beta_l \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} + V_{jk} U_{il} \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k \beta_l \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} \right\} \end{aligned} \quad (5.32)$$

Después de aplicar el teorema de Wick estadístico extendido a cada una de las trazas, queda:

$$\rho_{ij}^\pi = \sum_{kl} \left\{ V_{il}^* \widehat{\beta_k^\dagger \beta_l^\dagger} U_{kj}^\dagger + V_{il}^* \widehat{\beta_k \beta_l^\dagger} V_{kj}^T + U_{il} \widehat{\beta_k^\dagger \beta_l} U_{kj}^\dagger + U_{il} \widehat{\beta_k \beta_l} V_{kj}^T \right\} \quad (5.33)$$

En cuanto al tensor de apareamiento κ^π , su deducción se realiza de forma análoga:

$$\kappa_{ij}^\pi = \frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_j c_i \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} \quad (5.34)$$

Igualmente resulta conveniente traducir $c_j c_i$ a la base de cuasipartículas:

$$c_j c_i = \sum_{kl} \left\{ V_{jk}^* V_{il}^* \beta_k^\dagger \beta_l^\dagger + U_{jk} V_{il}^* \beta_k \beta_l^\dagger + V_{jk}^* U_{il} \beta_k^\dagger \beta_l + U_{jk} U_{il} \beta_k \beta_l \right\} \quad (5.35)$$

Sustituyendo ésto en la fórmula (5.34), se obtiene:

$$\begin{aligned} \kappa_{ij}^\pi = \sum_{kl} \left\{ V_{jk}^* V_{il}^* \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k^\dagger \beta_l^\dagger]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} + U_{jk} V_{il}^* \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k \beta_l^\dagger]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} + \right. \\ \left. + V_{jk}^* U_{il} \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k^\dagger \beta_l]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} + U_{jk} U_{il} \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_k \beta_l]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} \right\} \end{aligned} \quad (5.36)$$

De nuevo, aplicando el Teorema de Wick, aparecen las contracciones:

$$\kappa_{ij}^\pi = \sum_{kl} \left\{ V_{il}^* \widehat{\beta_l^\dagger \beta_k^\dagger}^T V_{kj}^\dagger + V_{il}^* \widehat{\beta_l \beta_k^\dagger}^T U_{kj}^T + U_{il} \widehat{\beta_l^\dagger \beta_k}^T V_{kj}^\dagger + U_{il} \widehat{\beta_l \beta_k}^T U_{kj}^T \right\} \quad (5.37)$$

También es necesario definir el tensor de apareamiento $\bar{\kappa}^\pi$ debido a su utilidad a la hora de reducir la expresiones de la energía proyectada:

$$\bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} = \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_i^\dagger c_j]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} \quad (5.38)$$

Procediendo de la misma manera que para ρ^π y κ^π , se encuentra:

$$c_i^\dagger c_j^\dagger = \sum_{kl} \left\{ U_{il}^* U_{jk}^* \beta_l^\dagger \beta_k^\dagger + U_{il}^* V_{jk} \beta_l^\dagger \beta_k + V_{il} U_{jk}^* \beta_l \beta_k^\dagger + V_{il} V_{jk} \beta_l \beta_k \right\} \quad (5.39)$$

$$\begin{aligned} \bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} = \sum_{kl} \left\{ U_{jk}^* U_{il}^* \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_l^\dagger \beta_k^\dagger]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} + U_{jk}^* V_{il} \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_l^\dagger \beta_k]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} + \right. \\ \left. + V_{jk} U_{il}^* \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_l \beta_k^\dagger]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} + V_{jk} V_{il} \frac{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \beta_l \beta_k]}{\text{Tr} [\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}}]} \right\} \end{aligned} \quad (5.40)$$

La expresión final del tensor de apareamiento $\bar{\kappa}_{ij}^{\pi*}$ es:

$$\bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} = \sum_{kl} \left\{ U_{il}^* \widehat{\beta_l^\dagger \beta_k^\dagger} U_{kj}^\dagger + V_{il} \widehat{\beta_l^\dagger \beta_k} U_{kj}^\dagger + U_{il}^* \widehat{\beta_l \beta_k^\dagger} V_{kj}^T + V_{il} \widehat{\beta_l \beta_k} V_{kj}^T \right\} \quad (5.41)$$

Una novedad importante frente a la aproximación EFA, es que la matriz densidad ρ_{ij}^π no es simétrica, como lo es $\rho_{ij}^0 = \frac{Tr[\mathcal{D}c_j^\dagger c_i]}{Tr[\mathcal{D}]}$, no obstante se puede expresar como suma de una parte simétrica y otra asimétrica:

$$\rho_{ij}^\pi = \rho_{ij}^{\pi S} + \rho_{ij}^{\pi A} \quad (5.42)$$

donde

$$\rho_{ij}^{\pi S} = \frac{1}{2} (\rho_{ij}^\pi + \rho_{ij}^{\pi T}) \quad (5.43)$$

$$\rho_{ij}^{\pi A} = \frac{1}{2} (\rho_{ij}^\pi - \rho_{ij}^{\pi T}) \quad (5.44)$$

denotando por “ T ” la operación de transposición.

Esta descomposición provoca que también el campo HF posea una parte simétrica y otra antisimétrica:

$$\Gamma_{ik}^{\pi A} = \sum_{lj} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj}^{\pi A} \quad (5.45)$$

$$\Gamma_{ik}^{\pi S} = \sum_{lj} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj}^{\pi S} \quad (5.46)$$

Esta descomposición en partes simétricas y antisimétricas es conveniente ya que la expresión de los campos para la fuerza de Gogny se simplifica significativamente cuando se tiene en cuenta dicha descomposición.

El tensor de apareamiento, por el contrario, se mantiene antisimétrico, por lo que no hace falta cambiar el procedimiento de su cálculo ni del campo de apareamiento Δ_{ij} .

Valor esperado de la energía proyectada

A través del operador densidad y de la descomposición del operador proyector, la energía proyectada se va a describir como el valor esperado del Hamiltoniano, de la siguiente forma:

$$\begin{aligned} E &= \frac{Tr[\hat{\mathcal{D}}\hat{H}] + \pi Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\mathcal{D}}] + \pi Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} = \\ &= \frac{Tr(\hat{\mathcal{D}})}{Tr(\hat{\mathcal{D}}) + \pi Tr(\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}})} \langle H \rangle + \pi \frac{Tr(\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}})}{Tr(\hat{\mathcal{D}}) + \pi Tr(\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}})} \langle \hat{\Pi}\hat{H} \rangle \end{aligned} \quad (5.47)$$

donde se ha utilizado la notación:

$$\langle \hat{H} \rangle = \frac{Tr [\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr [\hat{\mathcal{D}}]} \quad (5.48)$$

$$\langle \hat{\Pi}\hat{H} \rangle = \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} \quad (5.49)$$

De nuevo surgen dos contribuciones, que obligan a separar el cálculo para poder aplicar el teorema de Wick:

$$Tr [\hat{\mathcal{D}}\hat{H}] = Tr [\hat{\mathcal{D}}] \langle \hat{H} \rangle \quad (5.50)$$

$$Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}] = Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}] \langle \hat{\Pi}\hat{H} \rangle \quad (5.51)$$

La primera contribución no es más que la energía E^{EFA} y nuevamente queda por evaluar el término con el operador densidad proyectado.

Para calcular $Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]$ se van a analizar las contribuciones a uno y dos cuerpos del Hamiltoniano del sistema nuclear en segunda cuantización:

$$Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}] = \sum_{ij} t_{ij} Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_j] + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k] \quad (5.52)$$

La parte a un cuerpo $Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_j]$ es de sobra conocida puesto que se acaba de calcular en la matriz densidad

$$Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_j] = \rho_{ji}^\pi Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}] \quad (5.53)$$

La parte a dos cuerpos puede ser descompuesta en suma de varias contracciones debido al Teorema de Wick según se vio en el capítulo anterior:

$$\frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} = \widehat{c_i^\dagger c_k c_j^\dagger c_l} - \widehat{c_i^\dagger c_l c_j^\dagger c_k} + \widehat{c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k} = \quad (5.54)$$

$$= \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_k]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_j^\dagger c_l]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} - \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_l]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_j^\dagger c_k]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} + \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_i^\dagger c_j^\dagger]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} \frac{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}c_l c_k]}{Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]}$$

Puesto que $Tr [\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]$ aparece en el denominador de los dos miembros de la igualdad,

esta expresión se reduce a:

$$\begin{aligned}
 Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_i^\dagger c_j^\dagger c_l c_k \right] &= Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_i^\dagger c_k \right] Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_j^\dagger c_l \right] - Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_i^\dagger c_l \right] Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_j^\dagger c_k \right] + \\
 &+ Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_i^\dagger c_j^\dagger \right] Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} c_l c_k \right] = \\
 &= Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right] \left(\rho_{ki}^\pi \rho_{lj}^\pi - \rho_{li}^\pi \rho_{kj}^\pi - \bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} \kappa_{kl}^\pi \right)
 \end{aligned} \tag{5.55}$$

La nueva contribución a la energía proyectada es, por tanto:

$$Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \hat{H} \right] = Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right] \left(\sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^\pi + \frac{1}{4} \sum_{ijkl} \bar{v}_{ijkl} \left(\rho_{ki}^\pi \rho_{lj}^\pi - \rho_{li}^\pi \rho_{kj}^\pi - \bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} \kappa_{kl}^\pi \right) \right) \tag{5.56}$$

Se deducen así los nuevos campos, análogos a los descritos en la teoría ordinaria HFB. El campo HF es:

$$\Gamma_{ik}^\pi = \sum_{lj} \bar{v}_{ijkl} \rho_{lj}^\pi \tag{5.57}$$

que como se ha dicho anteriormente se descompone en suma de dos términos $\Gamma_{ik}^{\pi A}$ y $\Gamma_{ik}^{\pi S}$. Y el campo de apareamiento, por su parte, es:

$$\Delta_{ij}^\pi = \frac{1}{2} \sum_{kl} \bar{v}_{ijkl} \kappa_{kl}^\pi \tag{5.58}$$

La expresión final es:

$$\frac{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \hat{H} \right]}{Tr \left[\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right]} = \sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^\pi + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\Gamma_{ij}^\pi \rho_{ji}^\pi - \Delta_{ij}^\pi \bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} \right) \tag{5.59}$$

Finalmente la expresión total de la energía proyectada es:

$$\begin{aligned}
 E &= \frac{Tr \left(\hat{\mathcal{D}} \right)}{Tr \left(\hat{\mathcal{D}} \right) + \pi Tr \left(\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right)} \left[\sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\Gamma_{ij} \rho_{ji} - \Delta_{ij} \bar{\kappa}_{ij}^* \right) \right] + \\
 &+ \pi \frac{Tr \left(\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right)}{Tr \left(\hat{\mathcal{D}} \right) + \pi Tr \left(\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right)} \left[\sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^\pi + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\Gamma_{ij}^\pi \rho_{ji}^\pi - \Delta_{ij}^\pi \bar{\kappa}_{ij}^{\pi*} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

Proyección a paridad de número impar

Como ya se dijo, todas las expresiones anteriores de ρ_{ij}^π y κ_{ij}^π , así como de la energía total proyectada se pueden traducir a la proyección de la paridad de número simplemente cambiando el operador paridad $\hat{\Pi}$ por el operador $e^{i\pi\hat{N}}$. No obstante, algo específico que si que conviene hacer para la restauración de la paridad de número es estudiar el efecto que tiene la proyección sobre el operador densidad.

Puesto que en este trabajo se pretenden estudiar únicamente núcleos con número impar de nucleones, la proyección de la paridad de número que interesa es la negativa, para considerar únicamente contribuciones que provienen de configuraciones con un número impar de cuasipartículas. El proyector en este caso será:

$$\hat{P}_{-1} = \frac{1}{2} (\mathbb{I} - e^{i\pi\hat{N}}) \quad (5.61)$$

donde \hat{N} no es más que el operador número de partículas:

$$|\phi\rangle = \sum_n c_n |\psi_n\rangle \quad \hat{N} |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle \quad (5.62)$$

Para comprobar que es correcta la forma de este proyector, se va a estudiar la expresión del operador densidad que se obtiene al realizar la proyección a paridad de número impar. Sabiendo que $|\phi\rangle$ representa el vacío de cuasipartículas, el valor que tomará el segundo sumando de (5.61) será:

$$e^{i\pi\hat{N}} |\phi\rangle = e^{i\pi\hat{N}} \sum_n c_n |\psi_n\rangle = \sum_n c_n e^{i\pi n} |\psi_n\rangle \quad (5.63)$$

$$e^{i\pi n} = \begin{cases} +1 & \text{si } n \text{ es par} \\ -1 & \text{si } n \text{ es impar} \end{cases} \quad (5.64)$$

En la EFA $|\phi\rangle$, que representa el vacío de cuasipartículas, es una función de onda completamente apareada que tiene paridad de número par, por tanto se cumple:

$$e^{i\pi\hat{N}} |\phi\rangle = |\phi\rangle ; e^{i\pi\hat{N}} \beta_\mu^\dagger |\phi\rangle = -\beta_\mu^\dagger |\phi\rangle ; e^{i\pi\hat{N}} \beta_\mu^\dagger \beta_\mu^\dagger |\phi\rangle = \beta_\mu^\dagger \beta_\mu^\dagger |\phi\rangle \quad (5.65)$$

Finalmente se ve que el efecto conjunto de la proyección sobre cada estado de \hat{D} es:

$$\hat{P}_{-1} |\phi\rangle = 0 ; \hat{P}_{-1} \beta_\mu^\dagger |\phi\rangle = \beta_\mu^\dagger |\phi\rangle ; \hat{P}_{-1} \beta_\mu^\dagger \beta_\mu^\dagger |\phi\rangle = 0 \quad (5.66)$$

Ésto lleva a deducir la proyección del operador densidad que se buscaba, lo cual confirma el hecho de que sólo aparecen contribuciones de estados con número impar de partículas:

$$\hat{\mathcal{D}}_{-1} = \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\mu} + \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}} \quad (5.67)$$

La energía total proyectada al restaurar la simetría de paridad de número es, por tanto:

$$E_{p=-1} = \frac{1}{2} \left\{ \langle\phi| \beta_{\mu} \hat{H} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle + \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}} \hat{H} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle \right\} \quad (5.68)$$

Se espera que esta energía sea mejor que la energía de la EFA ya que sólo mantiene funciones de onda con paridad de número impar.

Casos particulares de la proyección a buena paridad

Volviendo a la simetría de Paridad, para ver cómo se modifica el operador densidad $\hat{\mathcal{D}}$ al realizar la proyección a buena paridad se puede estudiar el caso sencillo cuando $Q_{30} \rightarrow 0$. Para ello se van a deducir las expresiones concretas cuando se proyecta a paridad positiva y negativa suponiendo que se ha bloqueado un estado de cuasipartícula con paridad positiva o con paridad negativa.

Los operadores de proyección a paridad positiva y negativa tienen las siguientes formas:

$$\hat{P}_{+\pi} = \frac{1}{2} (\mathbb{I} + \hat{\Pi}) \quad \hat{P}_{-\pi} = \frac{1}{2} (\mathbb{I} - \hat{\Pi}) \quad (5.69)$$

El estado vacío de cuasipartículas, por tratarse de una representación del estado con número par de nucleones, tiene paridad positiva $\hat{\Pi} |\phi\rangle = + |\phi\rangle$, así que las transformaciones de proyección sobre el estado vacío de cuasipartículas tienen el siguiente efecto:

$$\hat{P}_{+\pi} |\phi\rangle = |\phi\rangle ; \quad \hat{P}_{-\pi} |\phi\rangle = 0 \quad (5.70)$$

Para los términos con una cuasipartícula bloqueada hay que analizar dos posibles situaciones: cuando el estado bloqueado tiene paridad positiva o tiene paridad negativa. Si la paridad del estado $\beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle$ es positiva, entonces:

$$\hat{\Pi} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle ; \quad \hat{\Pi} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle ; \quad \hat{\Pi} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle \quad (5.71)$$

Por tanto sus resultantes proyectados son:

$$\hat{P}_{+\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle ; \quad \hat{P}_{+\pi} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle ; \quad \hat{P}_{+\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle \quad (5.72)$$

De todo ello se observa que el operador densidad proyectado a paridad positiva cuando el estado de cuasipartículas bloqueado tiene paridad positiva mantiene su forma

completa:

$$\hat{\mathcal{D}}_{+\pi} = |\phi\rangle \langle\phi| + \beta_{\mu}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\mu} + \beta_{\bar{\mu}}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}} + \beta_{\mu}^{+} \beta_{\nu}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\nu} \beta_{\mu} \quad (5.73)$$

Pero si la paridad de $\beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle$ es negativa, entonces:

$$\hat{\Pi} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle = -\beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle ; \hat{\Pi} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = -\beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle ; \hat{\Pi} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} |\phi\rangle \quad (5.74)$$

Y la proyección a paridad positiva de cada uno de estos términos es:

$$\hat{P}_{+\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 ; \hat{P}_{+\pi} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 ; \hat{P}_{+\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} |\phi\rangle \quad (5.75)$$

El operador densidad proyectado a paridad positiva cuando el estado de cuasipartículas bloqueado tiene paridad negativa es:

$$\hat{\mathcal{D}}_{+\pi} = \frac{1}{4} (|\phi\rangle \langle\phi| + \beta_{\mu}^{+} \beta_{\nu}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\nu} \beta_{\mu}) \quad (5.76)$$

que, como se puede deducir fácilmente, coincide con la proyección del operador densidad a paridad de número par.

A continuación se van a estudiar las proyecciones sobre paridad negativa, en los dos mismos casos anteriores. Si la paridad del estado $\beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle$ es positiva, entonces:

$$\hat{P}_{-\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 ; \hat{P}_{-\pi} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 ; \hat{P}_{-\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 \quad (5.77)$$

Ésto indica que al proyectar a paridad negativa el operador densidad obtenido al bloquear los estados $\beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle$ y $\beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle$ con paridad positiva, el operador densidad proyectado es nulo:

$$\hat{\mathcal{D}}_{-\pi} = 0 \quad (5.78)$$

Los valores medios, así obtenidos son indeterminaciones $\frac{0}{0}$ que no se analizarán.

Pero si por el contrario, la paridad de $\beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle$ es negativa, entonces:

$$\hat{P}_{-\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\mu}^{\dagger} |\phi\rangle ; \hat{P}_{-\pi} \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle = \beta_{\bar{\mu}}^{\dagger} |\phi\rangle ; \hat{P}_{-\pi} \beta_{\mu}^{\dagger} \beta_{\nu}^{\dagger} |\phi\rangle = 0 \quad (5.79)$$

y el operador densidad proyectado queda:

$$\hat{\mathcal{D}}_{-\pi} = \frac{1}{4} (\beta_{\mu}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\mu} + \beta_{\bar{\mu}}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}}) \quad (5.80)$$

Es decir sólo quedan los términos con una cuasipartícula bloqueada, que coincide

con la proyección a paridad de número impar.

De todas estas expresiones se sacan las siguientes conclusiones:

1. Cuando se bloquea un estado de cuasipartícula con paridad positiva, la proyección a buena paridad positiva no aporta ninguna mejora. Pero cuando se bloquea un estado de cuasipartícula con paridad negativa, la proyección a paridad negativa sí que aporta cambios, ya que ese caso corresponde a la proyección de buena paridad de número negativa.
2. Otra diferencia es que la proyección $P_{+\pi}$ cuando el estado μ bloqueado tiene paridad negativa, sí que tiene contribución, la misma que la proyección a paridad de número par; mientras que la proyección $P_{-\pi}$ cuando se bloquea un estado cuasipartículas con $\pi = +1$ da una contribución indeterminada.

Cálculo del término de la interacción dependiente de la densidad

El término dependiente de la densidad en la interacción de Gogny es un término fenomenológico con el único fundamento de su éxito en los cálculos HFB y HF. Su introducción está basada en hechos físicos, ya que simula las interacciones de corto alcance que sólo se pueden tratar de manera adecuada en el contexto de la teoría HF Brueckner. Sin embargo no hay una deducción microscópica de su forma explícita, lo que hace imposible justificar cualquiera de las prescripciones que se pueden adoptar tanto a nivel de campo medio como más allá.

En el cálculo de la energía proyectada aparece una ambigüedad cuando se utiliza una interacción dependiente de la densidad. El problema es que la interacción depende de la función de onda intrínseca de campo medio $|\phi\rangle$ a través del término $\rho(\vec{r})^\alpha$, siendo $\rho(\vec{r})$ la densidad de campo medio y $\alpha = \frac{1}{3}$ para la fuerza de Gogny.

En teorías de campo medio está claro qué densidad se debe emplear. Tanto si se interpreta la energía de campo medio como un funcional de la densidad y del tensor de apareamiento de la función de onda intrínseca:

$$E[\rho, \kappa] = Tr \left(t\rho + \frac{1}{2} (\Gamma\rho + \Delta\kappa^\dagger) \right) \quad (5.81)$$

como si se hace en términos del valor esperado del Hamiltoniano en el estado $|\phi\rangle$:

$$E = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (5.82)$$

se llega a la misma conclusión, y es que la densidad nuclear a considerar es la densidad intrínseca $\rho(\vec{r})$

Sin embargo, en teoría proyectadas, y en general en teoría más allá de campo medio (método de la coordenada generadora, técnicas de proyección, etc.) ambas formas de interpretar la energía no llevan a la misma deducción para la densidad que hay que tomar.

Para el cálculo del término $\frac{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]}$ aparece la cuestión de qué densidad tiene que usarse en el término de la interacción dependiente de la densidad. Una posible respuesta es que como se está proyectando después de determinar el estado intrínseco, la densidad de campo medio debe usarse en todos los términos que aparecen en el cálculo de la energía. Sin embargo, se puede argumentar que si el término dependiente de la densidad viene del valor esperado de algún operador efectivo (como en alguna versión de la interacción de Skyrme, donde el término dependiente de la densidad viene de la interacción delta a tres cuerpos), entonces la parte dependiente de la densidad debe contener la densidad $\rho_\pi(\vec{r}) = \frac{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\rho]}{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]}$ en el cálculo de $\frac{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]}$ y $\rho(\vec{r})$ en el cálculo de $\langle H \rangle = \frac{Tr[\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\mathcal{D}}]}$.

En los cálculos que se han realizado se han utilizado estas dos prescripciones. Como prescripción 1 se denota a aquella que toma $\rho_\pi(\vec{r})$ en el cálculo de $\frac{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]}$ y $\rho(\vec{r})$ en el cálculo de $\langle H \rangle$. En la prescripción 2 se toma siempre $\rho(\vec{r})$ ya sea para calcular $\frac{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]}$ o $\frac{Tr[\hat{\mathcal{D}}\hat{H}]}{Tr[\hat{\mathcal{D}}]}$.

La prescripción 1, que toma la densidad $\rho_\pi(\vec{r})$, aparece como extensión directa del caso de campo medio, ya que la contribución a la energía del término de la interacción dependiente de la densidad se calcula como:

$$E^{DD} = \frac{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}V^{DD}]}{Tr[\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}]} \quad (5.83)$$

De aquí se puede deducir que la densidad que se tiene en cuenta en V^{DD} es la densidad de $\hat{\Pi}\hat{\mathcal{D}}$.

Por otro lado la prescripción 2 tiene justificación si se reduce la expresión de la energía proyectada a un valor promedio de los estados de campo medio:

$$E^{DD} = \frac{Tr[e^{i\pi\hat{N}^-}\hat{\mathcal{D}}V^{DD}]}{Tr[e^{i\pi\hat{N}^-}\hat{\mathcal{D}}]} \quad (5.84)$$

Un hecho importante que se observa al proyectar a buena paridad estados con buena paridad negativa es que el término de la interacción dependiente de la densidad diverge si se utiliza la prescripción 1.

La densidad espacial es:

$$\rho(\vec{r}) = \frac{\text{Tr} \left(\hat{\mathcal{D}} e^{i\pi \hat{N}} c_i^\dagger c_j \right)}{\text{Tr} \left(\hat{\mathcal{D}} e^{i\pi \hat{N}} \right)} \varphi_j^*(\vec{r}) \varphi_i(\vec{r}) \quad (5.85)$$

Para operadores a un cuerpo cuando el estado fundamental del núcleo impar tiene paridad positiva y se aplica la proyección a paridad negativa, se obtiene una divergencia $\frac{0}{0}$:

$$\text{Tr} \left(\hat{\mathcal{D}} \hat{\Pi} c_i^\dagger c_j \right) = 0 \quad (5.86)$$

$$\text{Tr} \left(\hat{\mathcal{D}} \hat{\Pi} \right) = 0 \quad (5.87)$$

En concreto la nueva contribución de la proyección a la energía es:

$$E^\pi = \frac{\text{Tr} \left(\hat{\mathcal{D}} \hat{\Pi} \hat{H} \right)}{\text{Tr} \left(\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right)} = \left[\sum_{ij} t_{ij} \rho_{ji}^{\pi 10} + \frac{1}{2} \sum_{ij} \left(\Gamma_{ij}^\pi \rho_{ji}^{\pi 10} - \Delta_{ij}^{\pi \kappa} \kappa_{ij}^{\pi 01*} \right) \right] \text{Tr} \left(\hat{\Pi} \hat{\mathcal{D}} \right) \quad (5.88)$$

5.2. Aproximación Adiabática de la Teoría TDHFB

A partir de la teoría microscópica HFB se puede deducir de un modo completamente microscópico un Hamiltoniano tipo Bohr para describir procesos colectivos ya sea aplicando la dinámica cuántica del GCM, ya sea con el método semi-clásico de la aproximación adiabática de la teoría dependiente del tiempo ATDHF B.

En concreto para deducir las inercias colectivas que tanto interesan en los procesos de fisión se ha utilizado el procedimiento basado en la ATDHF B ya que según estudios aporta mejores resultados que la deducción a partir de GCM.

A continuación se va a desarrollar la aproximación ATDHF B para deducir las expresiones de las masas colectivas. Esta aproximación proporciona una conexión entre una teoría microscópica del núcleo y los modelos fenomenológicos. Así se pueden deducir las expresiones microscópicas de los parámetros del modelo colectivo, como los momentos de inercia o las superficies de energía.

El objetivo de este método consiste en buscar estados intrínsecos cuando el sistema posee un movimiento colectivo donde las velocidades asociadas a las variables colectivas son pequeñas. Se va a suponer que el estado del núcleo es, en cada instante, un estado de cuasipartículas independientes y que el movimiento colectivo es adiabático. Para introducir la variable temporal en la ecuaciones se pueden utilizar dos métodos. El primero consiste en colocar el núcleo en campos exteriores dependientes del tiempo, para obtener explícitamente la dependencia con la velocidad.

La aproximación adiabática consiste en asumir que las velocidades colectivas provocadas por los campos exteriores son lentas, es decir que en la evolución dinámica colectiva

los movimientos son tan lentos que la estructura interna se mantiene invariable. En la aproximación de HFB el estado dinámico está representado por la matriz densidad generalizada dependiente del tiempo \mathcal{R} que verifica $\mathcal{R}^2 = \mathcal{R}$ y que es solución de la ecuación HFB dependiente del tiempo:

$$i\hbar\dot{\mathcal{R}} = \left[\mathcal{H} - \sum_i \lambda_i \mathcal{Q}_i, \mathcal{R} \right] \quad (5.89)$$

En lo que sigue se van a utilizar la matriz densidad generalizada \mathcal{R} , la matriz generalizada del Hamiltoniano y la matriz generalizada de los operadores \mathcal{Q} .

$$\mathcal{R} = \begin{pmatrix} \rho & \kappa \\ -\kappa^* & 1 - \rho^* \end{pmatrix} \quad (5.90)$$

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h & \Delta \\ -\Delta^* & -h^* \end{pmatrix} \quad (5.91)$$

$$\mathcal{Q}_i = \begin{pmatrix} Q_i & 0 \\ 0 & -Q_i^* \end{pmatrix} \quad (5.92)$$

La derivada de la matriz densidad con respecto al tiempo se expresa a través de los parámetros colectivos q_i y sus variaciones temporales \dot{q}_i

$$q_i(t) = Tr \left(\hat{Q}_i \rho(t) \right) \quad (5.93)$$

$$\dot{q}_i(t) = Tr \left(\hat{Q}_i \dot{\rho}(t) \right) \quad (5.94)$$

$$\dot{\mathcal{R}} = \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{R}}{\partial q_i} \quad (5.95)$$

Por tanto ahora ya no se busca la relación de la matriz densidad con el tiempo, sino con las variables colectivas. Tras este cambio, el movimiento colectivo ya no estará generado con los campos exteriores, sino por las funciones \dot{q}_i . Los parámetros λ_i se deben seguir interpretando como los multiplicadores de Lagrange que sirven para satisfacer los constraints (5.93). Todo esto significa que $\mathcal{R}(q)$ también es de hecho una función de las velocidades \dot{q}_i . Por ello la matriz densidad se anota como $\mathcal{R}(q, \dot{q})$

La aproximación adiabática asume que como los campos exteriores son débiles, sólo aparecen pequeñas oscilaciones alrededor de la densidad estacionaria \mathcal{R}_0 , que es a su vez solución de la ecuación HFB estacionaria $\left[\mathcal{H}(\mathcal{R}_0) - \sum_i \lambda_i^{(0)} \mathcal{Q}_i, \mathcal{R}_0 \right] = 0$. Por tanto la densidad se podrá desarrollar como:

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 + \mathcal{R}_1 \quad (5.96)$$

Los multiplicadores de Lagrange también se desarrollan:

$$\lambda(q, \dot{q}) = \lambda_i^{(0)}(q) + \lambda_i^{(1)}(q, \dot{q}) \quad (5.97)$$

$\lambda_i^{(0)}$ es tal que se cumple que $q_i = \text{Tr}(\hat{Q}_i \mathcal{R}_0)$.

Con estas expansiones, y con la dependencia explícita del tiempo sólo en las variables q_i y \mathcal{R}_0 , la ecuación TDHFB se puede escribir:

$$i\hbar \sum_i \dot{q}_i \frac{\partial \mathcal{R}_0}{\partial q_i} = \left[\frac{\delta \mathcal{H}(\mathcal{R}_0)}{\delta \mathcal{R}_0} \mathcal{R}_1 - \sum_i \lambda_i^{(1)} \mathcal{Q}_i, \mathcal{R}_0 \right] + \left[\mathcal{H}(\mathcal{R}_0) - \sum_i \lambda_i^{(0)} \mathcal{Q}_i, \mathcal{R}_1 \right] \quad (5.98)$$

Pero la derivada de \mathcal{R}_0 con respecto a q_i se puede obtener facilmente de las fórmulas que se obtienen para el efecto en la densidad de la perturbación de un constraint:

$$\frac{\delta \mathcal{R}_0}{\delta q_i} = \sum_k M_{(-1)ki}^{-1} \tilde{\mathcal{R}}_{1k} \quad (5.99)$$

La matriz $\tilde{\mathcal{R}}_{1k}$ viene dada por la expresion $\tilde{\mathcal{R}}_{1k} = i [\tilde{\mathcal{Z}}_k, \mathcal{R}_0]$ que suele reescribirse en terminos de un "operador momento" $\tilde{\mathcal{P}}_k = -\hbar \tilde{\mathcal{Z}}_k$ como

$$\tilde{\mathcal{R}}_{1k} = -\frac{i}{\hbar} [\tilde{\mathcal{P}}_k, \mathcal{R}_0] \quad (5.100)$$

y así

$$\sum_{ik} \dot{q}_i M_{(-1)ki}^{-1} [\tilde{\mathcal{P}}_k, \mathcal{R}_0] = \left[\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathcal{R}} \delta \mathcal{R}_1 - \sum_i \lambda_i^{(1)} \mathcal{Q}_i, \mathcal{R}_0 \right] + \left[\mathcal{H}_0 - \sum_i \lambda_i^{(0)} \mathcal{Q}_i, \delta \mathcal{R}_1 \right] \quad (5.101)$$

$$\left[\frac{\delta \mathcal{H}}{\delta \mathcal{R}} \delta \mathcal{R}_1 - \sum_i \left(\lambda_i^{(1)} \mathcal{Q}_i + \dot{q}_i \sum_k M_{(-1)ki}^{-1} \tilde{\mathcal{P}}_k \right), \mathcal{R}_0 \right] + \left[\mathcal{H}_0 - \sum_i \lambda_i^{(0)} \mathcal{Q}_i, \delta \mathcal{R}_1 \right] = 0 \quad (5.102)$$

Esta ecuación es idéntica a la de perturbación de una ligadura en respuesta lineal cambiando \mathcal{F}_j por $\lambda_i^{(1)} \mathcal{Q}_i + \dot{q}_i \sum_k M_{(-1)ki}^{-1} \tilde{\mathcal{P}}_k$. De forma que:

$$\mathcal{R}_1 = i \sum_k [\tilde{\mathcal{Z}}_k, \mathcal{R}_0] \quad (5.103)$$

con

$$i\mathbb{Z}_{j\sigma\rho} = \frac{1}{2}\mathbb{S}_{\rho\sigma\mu\nu}^{-1}(\rho_\nu - \rho_\mu) \left\{ \lambda_j^{(1)}\mathbb{Q}_j + \dot{q}_j \sum_k M_{(-1)kj}^{-1} \tilde{\mathbb{P}}_k \right\}_{\mu\nu} \quad (5.104)$$

y donde, como siempre, las matrices $\tilde{\mathbb{Z}}_k$ y \mathbb{Z}_k están relacionadas a través de la transformación de Bogoliubov $\mathbb{Z}_k = W\tilde{\mathbb{Z}}_k W^+$. Teniendo en cuenta que se debe cumplir

$$Tr(\mathbb{Q}_i \mathcal{R}_1) = 0 \quad (5.105)$$

para un \mathcal{R}_1 arbitrario, eso implica que:

$$\sum_j Tr(\mathbb{Q}_i \mathcal{R}_{1j}) = 0 \quad (5.106)$$

que se escribe en la base de cuasipartículas como:

$$\sum_j Tr(\mathbb{Q}_i [\mathbb{Z}_i, \mathbb{R}]) = 0 \quad (5.107)$$

Desarrollando esta expresión se obtienen la siguiente cadena de igualdades:

$$\sum_j \sum_{\mu\nu} (\mathbb{Q}_{i\mu\nu} [\mathbb{Z}_{j\nu\mu}(\rho_\mu - \rho_\nu)]) = 0 \quad (5.108)$$

$$\sum_{\mu\nu} \mathbb{Q}_{i\mu\nu} \mathbb{Z}_{j\nu\mu}(\rho_\mu - \rho_\nu) = \frac{1}{2i} \sum_{\mu\nu} \mathbb{Q}_{k\mu\nu}(\rho_\mu - \rho_\nu) \mathbb{S}_{\mu\nu\sigma\rho}^{-1}(\rho_\rho - \rho_\sigma) \lambda_j^{(1)} \mathbb{Q}_{j\sigma\rho} + \quad (5.109)$$

$$+ \frac{1}{2i} \sum_{l\mu\nu} \mathbb{Q}_{k\mu\nu}(\rho_\mu - \rho_\nu) \mathbb{S}_{\mu\nu\sigma\rho}^{-1}(\rho_\rho - \rho_\sigma) \dot{q}_j M_{(-1)lj}^{-1} \tilde{\mathbb{P}}_{l\sigma\rho} \quad (5.110)$$

En el último término

$$\sum_{\mu\nu} \mathbb{Q}_{k\mu\nu}(\rho_\mu - \rho_\nu) \mathbb{S}_{\mu\nu\sigma\rho}^{-1} = \sum_{\mu\nu} \mathbb{S}_{\sigma\rho\mu\nu}^{-1} \mathbb{Q}_{k\mu\nu}(\rho_\mu - \rho_\nu) = -2i\mathbb{Z}_{k\rho\sigma} \quad (5.111)$$

y puesto que \mathbb{Z}_i es hermítico el último término queda así:

$$\hbar \sum_l \sum_{\mu\nu} \mathbb{Z}_{k\mu\nu}^*(\rho_\nu - \rho_\mu) \mathbb{Z}_{l\sigma\rho} \dot{q}_j M_{(-1)lj}^{-1} = \hbar \left(\sum_l L_{kl} M_{(-1)lj}^{-1} \right) \dot{q}_j \quad (5.112)$$

Teniendo en cuenta que $\tilde{\mathbb{Z}}_{\rho\sigma} = -\tilde{\mathbb{Z}}_{\sigma\rho}$ entonces se obtiene que $L_{kl} = -L_{kl}$ lo que significa

que $L_{kl} = 0$. De igual forma si $L = 0$ entonces $\lambda_i^{(1)} = 0$ y se puede escribir finalmente:

$$i\mathbb{Z}_{j\sigma\rho} = \frac{1}{2}\mathbb{S}_{\rho\sigma\mu\nu}^{-1}(\rho_\nu - \rho_\mu) \left(\dot{q}_j \sum_k M_{(-1)kj}^{-1} \tilde{\mathbb{P}}_{k\mu\nu} \right) \quad (5.113)$$

Una vez obtenida la expresion del cambio en la densidad inducido por la variacion temporal de ésta, el siguiente paso en la construcción de un Hamiltoniano colectivo es el cálculo de la energía como función de las variables colectivas q_i y sus respectivas velocidades \dot{q}_i . Como se obtuvo en el cálculo de la perturbación de un constraint se tiene que:

$$E(q_i + \delta q_i) = E(q_i) + \frac{1}{2} \sum_{jl} \mathbb{Z}_{j\sigma\rho} \mathbb{S}_{\rho\sigma\mu\nu} \mathbb{Z}_{l\nu\mu} + O(\delta q_i^3) \quad (5.114)$$

En nuestro caso tenemos

$$\begin{aligned} & \sum_{jl} \mathbb{Z}_{j\sigma\rho} \mathbb{S}_{\rho\sigma\mu\nu} \mathbb{Z}_{l\nu\mu} = \quad (5.115) \\ & = -\frac{1}{4} \sum_{jlk k'} \dot{q}_j \dot{q}_l M_{(-1)kj}^{-1} M_{(-1)k'l}^{-1} \mathbb{S}_{\rho\sigma\alpha'\alpha}^{-1} (\rho_\alpha - \rho_{\alpha'}) \tilde{\mathbb{P}}_{k\alpha'\alpha} \mathbb{S}_{\rho\sigma\mu\nu} \mathbb{S}_{\mu\nu\beta'\beta}^{-1} (\rho_\beta - \rho_{\beta'}) \tilde{\mathbb{P}}_{k'\beta'\beta} = \\ & = -\frac{\hbar^2}{4} \sum_{jl} \dot{q}_j \dot{q}_l M_{(-1)kj}^{-1} M_{(-1)k'l}^{-1} \mathbb{S}_{\rho\sigma\alpha'\alpha}^{-1} (\rho_\alpha - \rho_{\alpha'}) \tilde{\mathbb{Z}}_{k\alpha'\alpha} (\rho_\sigma - \rho_\rho) \tilde{\mathbb{Z}}_{k'\rho\sigma} = \\ & = \frac{1}{4} \frac{\hbar^2}{4} \sum_{jl} \dot{q}_j \dot{q}_l M_{(-1)kj}^{-1} M_{(-1)k'l}^{-1} \mathbb{S}_{\sigma\rho\beta'\beta}^{-1} \mathbb{Q}_{k'\beta'\beta} (\rho_\beta - \rho_{\beta'}) (\rho_\sigma - \rho_\rho) \cdot \\ & \quad \cdot \mathbb{S}_{\rho\sigma\alpha'\alpha}^{-1} (\rho_\alpha - \rho_{\alpha'}) \mathbb{S}_{\alpha'\alpha\gamma'\gamma}^{-1} \mathbb{Q}_{k\gamma'\gamma} (\rho_\gamma - \rho_{\gamma'}) \end{aligned}$$

Definiendo un nuevo momento $M_{(-3)}$ como

$$\begin{aligned} M_{(-3)k'k} &= \frac{1}{16} \sum \mathbb{Q}_{k'\beta'\beta} (\rho_\beta - \rho_{\beta'}) \mathbb{S}_{\beta'\beta\sigma\rho}^{-1} (\rho_\sigma - \rho_\rho) \cdot \quad (5.116) \\ & \quad \cdot \mathbb{S}_{\rho\sigma\alpha'\alpha}^{-1} (\rho_\alpha - \rho_{\alpha'}) \mathbb{S}_{\alpha'\alpha\gamma'\gamma}^{-1} \mathbb{Q}_{k\gamma'\gamma} (\rho_\gamma - \rho_{\gamma'}) \end{aligned}$$

se llega finalmente a:

$$\frac{1}{2} \sum_{jl} \mathbb{Z}_{j\sigma\rho} \mathbb{S}_{\rho\sigma\mu\nu} \mathbb{Z}_{l\nu\mu} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{jlk k'} \dot{q}_j \dot{q}_l M_{(-1)kj}^{-1} M_{(-1)k'l}^{-1} M_{(-3)k'k} \quad (5.117)$$

que lleva a definir la matriz de masa colectiva como:

$$\mathcal{M}_{lj} = \sum_{kk'} M_{(-1)kj}^{-1} M_{(-3)k'k} M_{(-1)k'l}^{-1} = (M_{(-1)}^{-1T} M_{(-3)} M_{(-1)}^{-1})_{lj} \quad (5.118)$$

en términos de los llamados momentos de la RPA $M_{(-n)}$. De esta forma, la expresión final

de la energía será

$$E(q, \dot{q}) = \frac{\hbar^2}{2} \sum_{jl} \dot{q}_j \mathcal{M}_{lj} \dot{q}_l + V(q) \quad (5.119)$$

que no es más que la expresión clásica del hamiltoniano colectivo.

La evaluación de los momentos de la RPA es muy pesada desde un punto de vista computacional ya que hay que invertir la matriz \mathbb{S} que tiene una dimensionalidad muy alta. Es por ello que hay que recurrir a aproximaciones para la evaluación de dichos momentos y por tanto para la evaluación de las masas colectivas. La aproximación más inmediata es asumir que \mathbb{S} es diagonal de forma que

$$\mathbb{S}_{\mu\nu\rho\sigma}^{-1} \approx \frac{2}{(\bar{E}_\sigma - \bar{E}_\rho)(\rho_\sigma - \rho_\rho)} \delta_{\mu\sigma} \delta_{\nu\rho} \quad (5.120)$$

y así obtenemos finalmente:

$$(M_{(-n)})_{ij} = \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu} Q_{j\nu\mu}}{(\bar{E}_\nu - \bar{E}_\mu)^n} (\rho_\mu - \rho_\nu) \quad (5.121)$$

donde cada una de las cantidades viene dada por las expresiones:

$$Q_i = \begin{pmatrix} Q_i^{11} & Q_i^{20} \\ -Q_i^{20*} & -Q_i^{11*} \end{pmatrix} \quad (5.122)$$

$\rho = \begin{pmatrix} f & 0 \\ 0 & 1-f \end{pmatrix}$ y $\bar{E} = \begin{pmatrix} E & 0 \\ 0 & -E \end{pmatrix}$. Introduciendo estas expresiones en la fórmula de la ecuación (5.121) se obtiene:

$$\begin{aligned} M_{(-n)} &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{11} Q_{j\nu\mu}^{11}}{(E_\nu - E_\mu)^n} (f_\mu - f_\nu) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{11*} Q_{j\nu\mu}^{11*}}{(-E_\nu + E_\mu)^n} (1 - f_\mu - 1 + f_\nu) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{20} (-) Q_{j\nu\mu}^{20*}}{(-E_\nu - E_\mu)^n} (f_\mu - 1 + f_\nu) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{(-) Q_{i\mu\nu}^{20*} Q_{j\nu\mu}^{20}}{(E_\nu + E_\mu)^n} (1 - f_\mu - f_\nu) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{11} Q_{j\nu\mu}^{11*}}{(E_\nu - E_\mu)^n} (f_\mu - f_\nu) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{11*} Q_{j\nu\mu}^{11}}{(-)^n (E_\nu - E_\mu)^n} (-f_\mu + f_\nu) + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{20} Q_{j\nu\mu}^{20*}}{(-)^n (E_\nu + E_\mu)^n} (f_\mu - 1 + f_\nu) + \frac{1}{2} \sum_{\mu\nu} \frac{Q_{i\mu\nu}^{20*} Q_{j\nu\mu}^{20}}{(E_\nu + E_\mu)^n} (1 - f_\mu - f_\nu) \end{aligned} \quad (5.123)$$

Así se llega a la forma final que toman las contribuciones de las masas colectivas (5.118) deducidas de la aproximación adiabática de la teoría dependiente del tiempo.

Capítulo 6

Interacciones Nucleares

Hasta ahora, en los desarrollos llevados a cabo, no se ha nombrado nada acerca del tipo de potencial que interactúa entre los nucleones. Por este motivo, este capítulo está enfocado únicamente a describir el tipo de interacción que sienten los nucleones.

Una de las primeras características que se observan de la forma del potencial de interacción entre dos nucleones es una fuerte repulsión a cortas distancias, lo que se conoce como *corazón repulsivo*, lo que provoca el efecto de saturación nuclear. Otra característica importante es el corto alcance de la interacción nuclear.

Por otro lado, el potencial que sienten los nucleones dentro del núcleo es diferente al que sienten los nucleones *desnudos*. Fuera del núcleo cuando los nucleones interactúan, tienen libertad para ir a multitud estados finales. En cambio dentro del núcleo, el principio de exclusión de *Pauli* impide que los nucleones se sitúen en cualquier estado. Un núcleo en su estado fundamental tendrá una cantidad de estados ocupados hasta un cierto nivel, *el nivel de Fermi*. Si dos nucleones que están muy por debajo del nivel de Fermi interactúan y no lo hacen con suficiente energía, sólo serán capaces de ir a estados cercanos, que ya están ocupados. Luego sólo están permitidas colisiones suficientemente fuertes como para trasladar los nucleones a estados por encima de la superficie de *Fermi*. De esto se deduce que dentro del núcleo hay que hacer una renormalización de la fuerza. En este tipo de tratamientos se encuentra el enfoque de *Brückner*, donde partiendo de una fuerza desnuda, se usan proyectores para restringir el número de estados finales posibles a los que pueden ir las partículas. Luego la suma a los estados finales posibles se limita a los que realmente estén permitidos por el principio de exclusión de *Pauli*.

Mediante la renormalización de la fuerza aparecen los llamados *potenciales efectivos realistas*, que eliminan la parte de corazón repulsivo introduciendo un término dependiente de la densidad, de tal manera que si queremos aumentar la densidad, este término no lo permite, impidiendo el colapso. Esta táctica es capaz de mantener la propiedad de saturación a la vez que resuelve el problema numérico que genera el corazón repulsivo a la hora de calcular los elementos de matriz de la interacción *desnuda*. También hay que añadir que permite la aplicación de técnicas de muchos cuerpos, como los cálculos de campo medio.

6.1. Interacciones fenomenológicas efectivas

Las interacciones efectivas no han sido el único camino se ha seguido para resolver el tema de la fuerza nuclear, ya que en la práctica los cálculos son complicados y no siempre se consiguen buenos acuerdos con el experimento. Otra opción es el uso de aproximaciones fenomenológicas de la fuerza nuclear. Estas fuerzas fenomenológicas contienen un cierto número de parámetros que se ajustan de modo que reproduzcan los datos experimentales.

A pesar de que las interacciones que se extraen de las fuerzas realistas a dos cuerpos nucleón-nucleón poseen más fundamento que las interacciones que parametrizan las fuerzas efectivas, éstas últimas satisfacen los requerimientos básicos que se piden a la fuerza: reproducir lo mejor posible las propiedades nucleares y por otro lado ser lo más simple posible para que se puedan realizar cálculos sistemáticos.

En algunos casos este enfoque ha dado resultados muy buenos, usando sólo un número pequeño de parámetros, previamente ajustados, de tal manera que cubran un gran número de datos experimentales sobre un amplio rango de masas nucleares. Muchas de ellas han sido construidas con un propósito especial, como por ejemplo efectuar cálculos de tipo *Hartree-Fock* con los que se obtiene el campo nuclear de manera autoconsistente, o estudiar propiedades generales de los núcleos como las energías de enlace y las propiedades de saturación. Otras sirven como fuerzas efectivas entre nucleones de valencia o entre partículas y huecos. Aún no se ha dado una explicación microscópica completamente satisfactoria capaz de explicar el éxito de estas interacciones fenomenológicas de las que existen un número considerable.

Algunas de las interacciones efectivas realistas dependientes de la densidad más populares son, por ejemplo, la de *Skyrme*, propuesta como una interacción efectiva con un término a tres cuerpos, aunque hoy en día las interacciones de Skyrme usadas tienen un término dependiente de la densidad efectiva que no deducible a partir de una interacción a tres cuerpos.

6.2. Descripción de la interacción efectiva de Gogny

En general, en los métodos de *Hartree-Fock* y *Hartree-Fock-Bogoliubov*, la parte más complicada es la evaluación de los elementos de matriz de la interacción nuclear. Si a esto se añade que se trabaja con una base deformada, el tiempo de cálculo se incrementa de manera considerable. Éste es el inconveniente principal para realizar cálculos extensivos con fuerzas como la de *Skyrme*. En 1975 *Gogny* [56] propuso un método que permitía evaluar los elementos de matriz de las interacciones a dos cuerpos de rango infinito, y en el que se podían utilizar tanto bases esféricas como deformadas.

Es indudable que el uso de fuerzas de rango finito es tan importante para el estudio de muchas correlaciones en el núcleo, como lo son las correlaciones de apareamiento. Además, no existen evidencias de que las interacciones de muy corto alcance sean capaces de simular el largo alcance o incluso el alcance intermedio de las interacciones efectivas. Con el objetivo de tratar de una manera adecuada las correlaciones de apareamiento, usando el procedimiento de *Hartree-Fock-Bogoliubov*, se introdujo la *Fuerza de Gogny*.

Los componentes de espín y de isoespín de la fuerza de *Gogny* se determinan de manera separada, cosa que no comparte la deducción que se hizo en la fuerza de *Skyrme*. En cuanto a la forma, la *Fuerza de Gogny*, al igual que la fuerza de *Skyrme*, está compuesta de un término central y de un término espín-órbita. Sin embargo, el término central incluye un término que depende de la densidad y cuya parte radial toma la forma de función delta. La otra componente de la parte central son dos gaussianas, donde una simula el corto alcance y la otra el alcance intermedio y se denomina de *Brink-Boeker*. Además de las mencionadas gaussianas, el término central cuenta con los usuales operadores de intercambio de espín \hat{P}_σ , de isoespín \hat{P}_τ , y de espacio $\hat{P}_\sigma\hat{P}_\tau$. En esta interacción el término dependiente de la densidad juega un papel importante, asegurando la saturación de la materia nuclear. En resumen esta interacción se puede escribir así:

$$\begin{aligned}
V_{12} = & \sum_{i=1}^2 (W_i + B_i\hat{P}_\sigma - H_i\hat{P}_\tau - M_i\hat{P}_\sigma\hat{P}_\tau) e^{-\frac{(\vec{r}_1-\vec{r}_2)^2}{\mu_i^2}} \\
& + i W_{LS}(\overleftarrow{\nabla}_1 - \overleftarrow{\nabla}_2) \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)(\overrightarrow{\nabla}_1 - \overrightarrow{\nabla}_2) \cdot (\vec{\sigma}_1 + \vec{\sigma}_2) \\
& + t_0 (1 + x_0\hat{P}_\sigma)\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[\rho\left(\frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2}\right) \right]^\gamma + V_{Coul}
\end{aligned} \tag{6.1}$$

donde $W_i, B_i, H_i, M_i, t_0, x_0, \mu_i$ y γ son parámetros ajustables.

En este punto solamente queda por determinar el valor de los parámetros de la interacción. El más obvio de obtener, y que fue el primero que ajustó, es la intensidad de la interacción espín-órbita W_{LS} . Éste se determinó independientemente de los demás parámetros de manera que ajustara la diferencia de energía entre los niveles $1p_{1/2}$ y $1p_{3/2}$ en el ^{16}O . A continuación se seleccionó un conjunto de valores para los parámetros (t_0, x_0, μ_1 y μ_2) y se ajustaron los ocho restantes de manera que reprodujeran las propiedades de los números mágicos ^{16}O y ^{90}Zr . Al ajustar las propiedades de saturación de estos núcleos usando el procedimiento de *Hartree-Fock*, se obtienen cuatro ecuaciones lineales en función de las variables ($S_i + G_i$) y ($S_i - G_i$), donde estas magnitudes se definen como:

$$S_i = 4W_i + 2(B_i - H_i) - M_i \tag{6.2}$$

$$G_i = 4W_i + 2(B_i - H_i) - 4M_i \quad i = 1, 2 \tag{6.3}$$

Se evaluó la energía por nucleón E/A de la materia nuclear y el momento de *Fermi* k_f de saturación, además del espectro de una partícula del ^{16}O calculado en el marco de la teoría de *Hartree-Fock*. La diferencia en energía entre las capas, el gap, está gobernada fundamentalmente por el término dependiente de la densidad, con lo que se puede ajustar el valor del parámetro t_0 a partir de la diferencia de energía entre los niveles $d_{5/2}$ y $p_{1/2}$. Como último paso en la deducción de los parámetros de la interacción, se observaron las propiedades de apareamiento y las cuestiones de simetría entre los nucleones. Por lo que se derivaron dos ecuaciones para calcular la diferencia de energía entre los niveles $2s_{1/2}$ del sistema neutrónico y $2s_{1/2}$ del sistema protónico en el ^{48}Ca y la energía de simetría de la materia nuclear. Otras dos nuevas ecuaciones provenientes de la imposición de ciertos valores de los elementos de matriz del acoplamiento

$$\left\langle (1s)^2 J = 0 \left| V \right| (1s)^2 J = 0 \right\rangle_{T=1} \quad \left\langle (2s)^2 J = 0 \left| V \right| (2s)^2 J = 0 \right\rangle_{T=1}$$

Los valores que se impusieron se eligieron de tal modo que los efectos debidos al apareamiento en los isótopos de estaño se reprodujeran correctamente.

Estos primeros parámetros obtenidos por D. *Gogny*, recibieron el nombre de *interacción D1*.

$$\begin{aligned}
 W_1 &= -402,40 \text{ MeV} & W_2 &= -21,30 \text{ MeV} \\
 B_1 &= -100,00 \text{ MeV} & B_2 &= -11,77 \text{ MeV} \\
 H_1 &= -496,2 \text{ MeV} & H_2 &= 37,27 \text{ MeV} \\
 M_1 &= -23,56 \text{ MeV} & M_2 &= -68,81 \text{ MeV} \\
 \mu_1 &= 0,7 \text{ fm} & \mu_2 &= 1,2 \text{ fm} \\
 t_0 &= 1350 \text{ MeV} & x_0 &= 1 \\
 \gamma &= 1/3 & W_{LS} &= -130 \text{ MeV}
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

Muchos cálculos mostraron que esta parametrización era capaz de describir de manera satisfactoria una gran variedad de propiedades nucleares, como las masas del estado fundamental y radios nucleares, efectos par-impar, excitaciones colectivas de pequeña amplitud y niveles bajos en núcleos blandos. Los resultados espectroscópicos en núcleos de transición, en particular, fueron una prueba de las propiedades de apareamiento y de deformación de esta fuerza, ya que la superficie de energía potencial y la inercia colectiva son muy sensibles a los detalles del espectro de cuasipartículas.

En el comportamiento a grandes deformaciones, la barrera de fisión que se obtuvo para el ^{240}Pu mostró una sobreestimación de la energía potencial en esta región. Este efecto se corrigió posteriormente disminuyendo de 20,2 *MeV* a 19 *MeV* el coeficiente de superficie de la interacción. Todas las demás características de la fuerza permanecieron, prácticamente, iguales. Con esta nueva parametrización, conocida como interacción *DIS* se logró reproducir de manera satisfactoria la barrera de fisión para el ^{240}Pu . Los valores que toman cada uno de los parámetros de esta interacción son los siguientes:

$$\begin{aligned}
 W_1 &= -1720,30 \text{ MeV} & W_2 &= 103,639 \text{ MeV} \\
 B_1 &= 1300,00 \text{ MeV} & B_2 &= -163,483 \text{ MeV} \\
 H_1 &= -1813,53 \text{ MeV} & H_2 &= 162,812 \text{ MeV} \\
 M_1 &= 1397,60 \text{ MeV} & M_2 &= -223,934 \text{ MeV} \\
 \mu_1 &= 0,7 \text{ fm} & \mu_2 &= 1,2 \text{ fm} \\
 t_0 &= 1390,6 \text{ MeV} & x_0 &= 1 \\
 \gamma &= 1/3 & W_{LS} &= 130 \text{ MeV}
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

Gracias al término dependiente de la densidad incluido en la interacción de Gogny, se es capaz de reproducir la energía de ligadura, el radio nuclear, las energías de los orbitales, etc.

La teoría HFB permite deducir los campos promedios creados por todos los nucleones del núcleo. Teniendo en cuenta las correlaciones de apareamiento, los campos obtenidos son Γ y Δ . En Γ están incluidos los términos de directo (Hartree) y de intercambio (Fock). De forma que el valor esperado del Hamiltoniano nuclear es:

$$E = \langle \hat{H} \rangle = Tr(t\rho) + \frac{1}{2}Tr(\Gamma\rho) - \frac{1}{2}Tr(\Delta\kappa^*) \quad (6.6)$$

Además de la interacción nuclear, la energía cinética también tiene una contribución a dos cuerpos proveniente de la corrección del centro de masas:

$$\hat{T} = \sum_i \frac{\vec{p}_i^2}{2m} \left(1 - \frac{1}{A}\right) - \frac{1}{Am} \sum_{i>j} \vec{p}_i \cdot \vec{p}_j. \quad (6.7)$$

Sabiendo que los protones por tener carga va a sentir una repulsión debida a su naturaleza eléctrica, se tendrá que añadir la fuerza de repulsión de Coulomb:

$$v_{12}^C = (1 + 2\tau_{1z})(1 + 2\tau_{2z}) \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \quad (6.8)$$

Como se acaba de ver la interacción de Gogny está formada por la parte de Brink Boeker (BB), la de espín-órbita (SO) y la contribución dependiente de la densidad (DD).

La energía total HFB se puede escribir como:

$$E = Tr(t\rho) + V_{BB} + V_{SO} + V_{DD} + V_{TK} + V_C \quad (6.9)$$

donde cada contribución V es calculada mediante el correspondiente campo Hartree–Fock, Γ , y de apareamiento Δ . El cómputo global de contribuciones será:

$$E_H = \frac{1}{2}Tr(\Gamma^H\rho) \text{ término directo} \quad (6.10)$$

$$E_F = \frac{1}{2}Tr(\Gamma^F\rho) \text{ término de intercambio} \quad (6.11)$$

$$E_\Delta = -\frac{1}{2}Tr(\Delta\kappa^*) \text{ término de apareamiento} \quad (6.12)$$

$$E = Tr(t\rho) + E_H^{BB} + E_F^{BB} + E_\Delta^{BB} + E_H^{SO} + E_F^{SO} + E_\Delta^{SO} + E_H^{DD} + E_F^{DD} + E_\Delta^{DD} + \quad (6.13)$$

$$+E_H^{TK} + E_F^{TK} + E_\Delta^{TK} + E_H^C + E_F^C + E_\Delta^C$$

De todos estos términos hay algunos que pueden ser despreciados, otros que pueden calcularse aproximadamente, y otros que por el contrario deben ser tenidos en cuenta exactamente debido a su relevancia. Así para evaluar el término de intercambio que proviene de la interacción de Coulomb se ha usado la aproximación de Slater, justificada en varios de estudios [26], [45]:

$$E_{CE} = -\frac{3}{4}e^2 \left(\frac{3}{\pi}\right)^{1/3} \int [\rho^p(\vec{r})]^{3/4} d^3\vec{r} \quad (6.14)$$

El termino directo de la interacción de Coulomb es:

$$E_{CD} = \frac{1}{2} \int \int \rho^p(\vec{R}_1) \frac{e^2}{|\vec{R}_1 - \vec{R}_2|} \rho^p(\vec{R}_2) d^3\vec{R}_1 d^3\vec{R}_2 \quad (6.15)$$

Para calcular el termino $\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$ se suele utilizar la aproximación siguiente:

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{d\mu}{\mu^2} e^{-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{\mu^2}} \quad (6.16)$$

se ha despreciado la contribución de la interacción de Coulomb al campo de apareamiento.

En cuando a los términos de apareamiento, ni las contribuciones de Coulomb para los protones, ni la interacción de espín-órbita para protones y neutrones merecen un especial tratamiento, ya que sus aportaciones no modifican en gran manera la energía total.

Los operadores de cuasipartículas se han expandido en la base de oscilador armónico axial. Se ha prestado una especial atención a la convergencia de los resultados en función del número de estados de la base incluidos.

De acuerdo a algunos estudios, se puede demostrar que para valores de N mayores que 10 – 15 los resultados son independientes de los parametros de la base del oscilador, y en esos caso no es necesario optimizar tales parámetros [20]. Ésto puede justificar que en algunos casos no se optimice la base del oscilador armónico porque es suficientemente grande como para que se encuentre la convergencia de un modo seguro.

6.3. Detalles de los cálculos

En todos los cálculos que se han realizado se ha impuesto, como mínimo tres ligaduras. Las dos primeras son los valores del número de protones y de neutrones. Puesto que la teoría HFB rompe la simetría del número de partículas, mediante las ligadura en Z y N, al menos se obtiene un valor en promedio adecuado. La tercera ligadura fija la coordenada del

centro de masas en el origen. Con ésto se pretende evitar la aparición de estados espurios debidos al movimiento de dicha coordenada [38].

Adicionalmente se pueden añadir otro tipo de ligaduras. Por ejemplo para el estudio de las barreras de fisión se ha impuesto una ligadura en Q_{20} el momento cuadrupolar de masa. Para el estudio de octupolaridad se ha añadido una ligadura en Q_{30} momento octupolar.

La transformación generalizada de Bogoliubov puede mezclar estados de diferentes paridades, por tanto se permite la ruptura de la simetría de reflexión para adoptar deformaciones octupolares.

Capítulo 7

Resultados

Una vez que se han expuesto las aproximaciones y métodos teóricos que se van a considerar, sólo falta contar qué fenómenos y regiones interesa estudiar para ver la validez de estos métodos, así como los resultados que se han obtenido.

Son tres, básicamente los bloques de análisis que se han realizado. Primeramente se han estudiado las correlaciones octupolares en los núcleos Radio y Torio, partiendo de la descripción de campo medio EFA y mejorándola con la técnica de proyección a buena paridad. A continuación se ha hecho una inmersión en el fenómeno de la fisión. Para ello se han estudiado las barreras de fisión de varios núcleos de la región de los actínidos ligeros. Por último, se ha pretendido reproducir la desintegración α del núcleo ^{245}Es hasta llegar al ^{213}Bi empleando el campo medio en la aproximación EFA y la proyección a buena paridad.

Pero antes de realizar todos estos estudios ha sido necesario hacer un análisis sobre el grado de confianza que tienen los resultados de la EFA. Un método es comparar sus resultados con los obtenidos con la técnica habitual de bloqueo. Por su simplicidad y fácil manejo se ha elegido otro método y es ver el efecto de la restauración de la simetría de paridad de número sobre el operador densidad de la EFA. Por ello el primer apartado de este capítulo de resultados se dedica a estudiar este efecto en los distintos bloques de estudio mencionados en el párrafo precedente.

7.1. Estudio de validez de la EFA

El primer paso que se debe considerar, tras presentar la teoría que describe los núcleos impares utilizando la aproximación EFA, es analizar el grado de validez de la aproximación. Teniendo en cuenta que la técnica habitual de bloqueo utilizada en los núcleos impares, es invariante bajo la simetría de paridad de número, el criterio para estudiar la validez de la EFA recaerá sobre esta simetría. Como ya se vio, la paridad de número no es simetría en la aproximación EFA, por tanto el efecto que la restauración de la paridad de número tenga sobre sus resultados indicará el grado de confianza que se puede dar a esta aproximación. Es útil recordar que con la EFA, los valores esperados de los operadores se calculan como suma de las cuatro contribuciones siguientes:

$$\langle \hat{O} \rangle^{EFA} = \frac{1}{4} \left\{ \langle \phi | \hat{O} | \phi \rangle + \langle \phi | \alpha_\mu \hat{O} \alpha_\mu^\dagger | \phi \rangle + \langle \phi | \alpha_{\bar{\mu}} \hat{O} \alpha_{\bar{\mu}}^\dagger | \phi \rangle + \langle \phi | \alpha_\mu \alpha_{\bar{\mu}} \hat{O} \alpha_{\bar{\mu}}^\dagger \alpha_\mu^\dagger | \phi \rangle \right\} \quad (7.1)$$

Es evidente que se rompe la simetría de paridad de número por haber mezcla de estados con paridad de número par e impar. Al proyectar a paridad de número impar, se mantienen únicamente los términos centrales de (7.1) que son los únicos que, independientemente, describen sistemas con número impar de cuasipartículas.

Puesto que el tema de interés de esta tesis es el estudio de núcleos impares aplicado al grado de libertad octupolar, fenómeno de la fisión y desintegración α , resulta evidente, que éstos son los mejores casos para evaluar el efecto de la proyección a paridad de número para determinar el grado de confianza que se espera de los resultados HFB-EFA. Por ello se ha hecho un análisis del efecto de la proyección de la paridad de número en el cálculo de superficies de energía potencial al constreñir el momento cuadrupolar Q_{20} (en el estudio del ^{235}U) como el momento octupolar Q_{30} (en el estudio del estudio del Radio y Torio).

Aunque este análisis se ha llevado a cabo en los isótopos impares de $^{221-231}\text{Ra}$ y $^{221-231}\text{Th}$ y de varios actínidos ligeros que presentan el fenómeno de la fisión, sólo se van a presentar los resultados de algunos de ellos, ya que el efecto en todos ellos es similar.

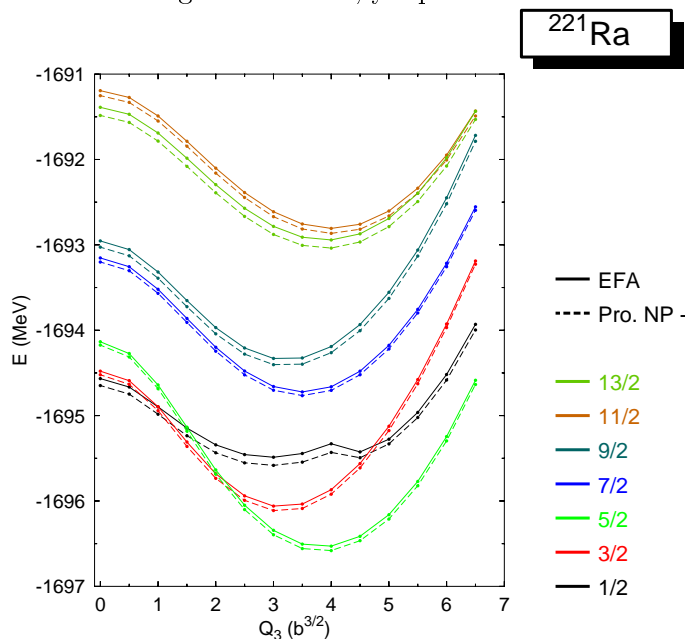


Figura 7.1: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra a nivel de campo medio EFA (líneas continuas), junto con los resultados proyectados a paridad de número impar (líneas discontinuas).

Como se ve en la figura 7.1 las diferencias entre los resultados de EFA y los proyectados a buena paridad de número son muy pequeñas. Los valores de las energías para la configuración de energía más baja $j_z = \frac{5}{2}$ del ^{221}Ra se encuentran en el cuadro 7.1. Se puede comprobar que la diferencia es muy pequeña, apenas llega a 60 keV.

También es curioso ver el comportamiento de los resultados proyectados a paridad

de número par, donde sólo se tiene en cuenta la contribución de los términos con paridad de número par. Los resultados se muestran en la figura 7.2. Se puede comprobar que su efecto es opuesto, es decir, que modifica su valor en unos pocos keV quedando por encima de los resultados EFA.

$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro} (MeV)$	$Q_{30} (fm^3)$
1694.135	-1694.174	0
-1694.273	-1694.313	500
-1694.641	-1694.684	1000
-1695.136	-1695.18	1500
-1695.637	-1695.686	2000
-1696.050	-1696.101	2500
-1696.344	-1696.396	3000
-1696.505	-1696.557	3500
-1696.529	-1696.581	4000
-1696.414	-1696.465	4500
-1696.161	-1696.212	5000

Cuadro 7.1: Comparación de las energías HFB-EFA y proyectadas a paridad de número impar para la configuración de menor energía $j_z = 5/2$ en el núcleo ^{221}Ra . En la columna de la izquierda se muestran las energías HFB-EFA, en la columna central están las energía proyectadas, y en la columna de la derecha se registran los valores de los momentos octupolares.

En el resto de configuraciones e isótopos los resultados son similares.

El estudio llevado a cabo en las barreras de fisión arroja el mismo comportamiento, tal cual se puede ver en la figura 7.3. En el panel superior se muestran las diferencias de energía. Sus valores no llegan a superar los 150 keV, lo que significa que su aportación es muy reducida.

De lo visto en estos dos estudios se puede concluir que la mejora que se consigue al proyectar a paridad de número impar es muy pequeña en comparación con la energía absoluta. Por ello se deduce que los resultados de la EFA son fiables, puesto que al intentar mejorar tomando sólo los términos de paridad de número impar que contribuyen en el valor esperado de la energía, se encuentra, básicamente el mismo resultado. Así queda demostrado que la aproximación EFA es una muy buena aproximación para describir núcleos impares. La comparación con el método ordinario de bloqueo lleva indiscutiblemente a asumir la carencia por parte de la EFA de la ganancia en energía proveniente de la ruptura de la invariancia temporal, que genera una deformación triaxial debida a la polarización del nucleón desapareado.

7.2. Correlaciones octupolares

De toda la tabla periódica de elementos, existen zonas bien conocidas, donde aparecen núcleos con deformación octupolar. Teóricamente se sabe que estas regiones corresponden a núcleos donde el nivel de Fermi está entre estados $|j_1, l_1, \pi_1\rangle$ y $|j_2, l_2, \pi_2\rangle$ cuya diferencia

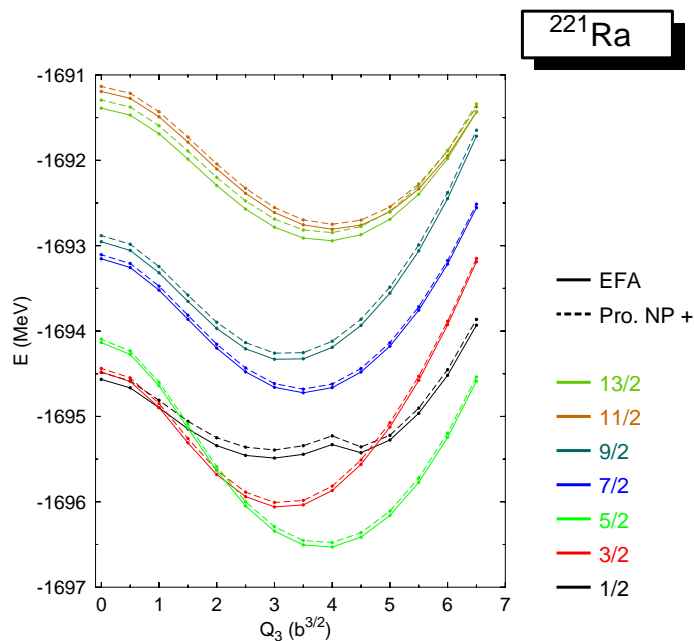


Figura 7.2: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra a nivel de campo medio EFA, junto con los resultados tras la proyección a paridad de número par.

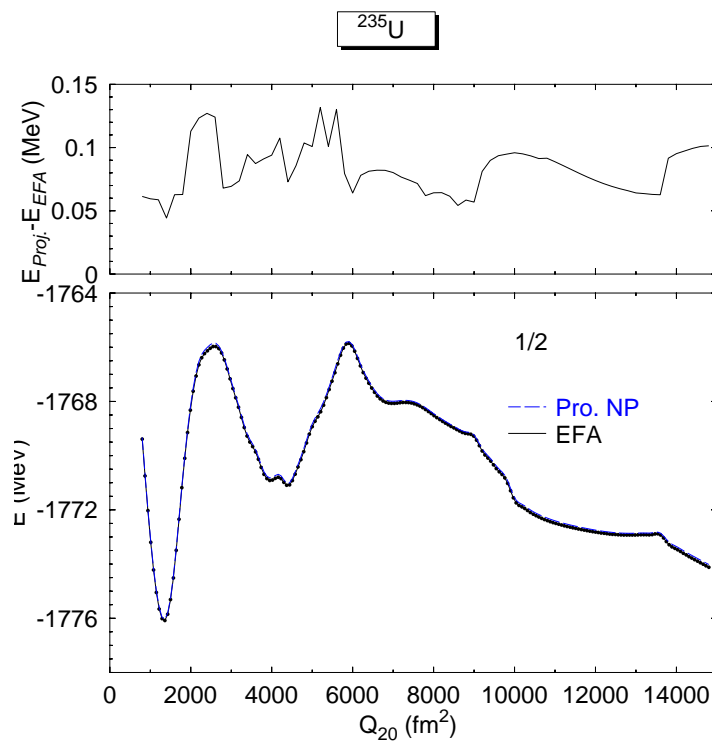


Figura 7.3: En el panel inferior se muestran las superficies de energía potencial para los resultados EFA y los proyectados a paridad de número impar para la configuración de mínima energía $j_z = 1/2$ en el núcleo ^{235}U . En el panel superior se muestran las diferencias entre ambas descripciones.

en momento angular es $|j_2 - j_1| = 3$, en la proyección del momento angular es $|l_2 - l_1| = 3$ y sus paridades cumplen: $\pi_1\pi_2 = -1$. En estos casos es muy probable que los núcleos se deformen octupolarmente. En la figura 7.4 se muestran estas regiones en el esquema de niveles de partículas.

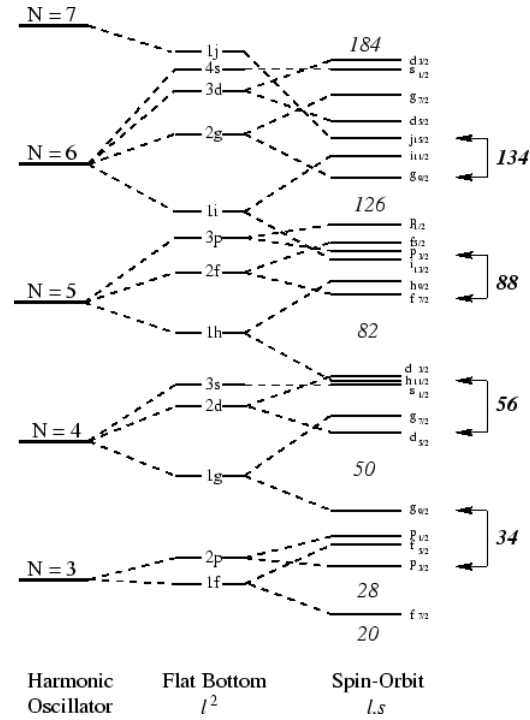


Figura 7.4: Esquema de niveles de partículas indicando los orbitales que favorecen la deformación octupolar ($\Delta l = 3$, $\Delta j = 3$ y $\Pi_i\Pi_j = -1$). Se indican también los números de partículas típicos para los que uno de los orbitales está completamente lleno y el otro completamente vacío. Para esos valores de N y Z es donde es más favorable la aparición de deformación octupolar estable.

Una región importante donde se sabe que existen casos con deformación octupolar estable es la correspondiente a número de protones o neutrones aproximadamente igual a 34, 56, 88 y 134.

Para estudiar este fenómeno de la deformación octupolar estable se han seleccionado como representantes característicos a los isótopos del Radio y Torio: ^{221}Ra – ^{231}Ra y ^{221}Th – ^{231}Th , todos ellos núcleos con A impar. El motivo de dicha elección es que tanto el valor de Z (88 para el Radio y 90 para el Torio) como el de N (134 para el ^{222}Ra) coinciden razonablemente con los valores de Z y N para los que se esperan fuertes correlaciones octupolares [19] [5] [48].

Particularidades de los cálculos

Este estudio de la deformación octupolar ha consistido en dos fases. En la primera se han realizado los cálculos con la aproximación EFA construyendo los valores del momento octupolar Q_{30} . En la segunda parte se han proyectado todos los resultados anteriores a buena paridad. Como ya se contó en el capítulo 5 al hablar de la proyección, el tratamiento más

adecuado por su simplicidad a la hora del cálculo computacional, es la proyección después de la variación con ligaduras, por eso primero se han hecho los cálculos en la aproximación EFA con una ligadura en Q_{30} con valores desde 0 hasta $6500 fm^3$ dejando libre el grado de libertad octupolar y posteriormente se ha aplicado la proyección a buena paridad.

El espectro de estados de cuasipartículas del que se ha partido ha sido distinto para cada isótopo. Se ha comenzado con el ^{220}Ra para el ^{221}Ra y se ha terminado con el ^{232}Ra para el núcleo ^{231}Ra .

Debido a la complejidad a la hora de obtener las configuraciones de energía más baja se ha bloqueado únicamente el primer nivel para cada grupo de estados j_z , excepto para el isótopo ^{223}Ra en que se han bloqueado los tres primeros niveles de cada j_z .

La base que se ha utilizado para realizar sus cálculos tiene MZMAX=14 y $q=1.0$. No se han optimizado las longitudes del oscilador de la base, sino que se han tomado los valores: $b_z = 2,1$ y $b_{\perp} = 2,1$.

Procedimientos para el ajuste de ΔN

Antes de entrar en los detalles de estos cálculos, hay que hacer una pequeña reseña acerca de los valores esperados del número de partículas. Las funciones de onda intrínsecas son del tipo HFB, y por tanto sólo tienen el número correcto de partículas en promedio. No hay ninguna razón por la que la función de onda proyectada tenga el número de partículas correcto en promedio. De forma que es necesario corregir las funciones de onda intrínsecas para obtener el número de partículas proyectado correcto. En este caso la ligadura en el número de partículas se debe cambiar usando la condición proyectada correspondiente para cada paridad y tipo de nucleón. Ésto hará que los cálculos intrínsecos sean más complicados e incluso multiplicar el coste computacional por un factor, al menos de dos.

Sin embargo, la desviación del número de partículas proyectado no es muy grande, lo que permite un tratamiento perturbativo de este problema.

$$\langle \hat{N} \rangle = \frac{Tr [\hat{\mathcal{D}} \hat{N}]}{Tr [\hat{\mathcal{D}}]} = N_0 \quad (7.2)$$

$$\langle \hat{\mathcal{P}} \hat{N} \rangle = \frac{Tr [\hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{D}} \hat{N}]}{Tr [\hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{D}}]} \neq N_0 \quad (7.3)$$

El desarrollo perturbativo para el valor de la energía es:

$$E_{\pi} = \frac{\langle \phi | \hat{P}_{\pi} \left(\hat{H} - \lambda \left(\hat{N} - N_0 \right) \right) | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}_{\pi} | \phi \rangle} \quad (7.4)$$

donde λ es el potencial químico proyectado. En el primer procedimiento que se ha empleado, se ha aproximado el potencial químico proyectado por el potencial químico de campo medio:

$$E_\pi = \frac{\langle \phi | \hat{P}^\pi \left(\hat{H} - \lambda_{protones} (\hat{Z} - Z_0) - \lambda_{neutrones} (\hat{N} - N_0) \right) | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}^\pi | \phi \rangle} \quad (7.5)$$

$$\lambda = \frac{dE}{dN} \quad (7.6)$$

La energía proyectada se corrige, por tanto, utilizando el potencial químico obtenido en los cálculos de EFA:

$$E' = E_p - \lambda(N_p - N_0) \quad (7.7)$$

donde N_p es el valor obtenido proyectado y N_0 es el valor que se busca.

Existe otra forma de hacer que después de la proyección el valor promedio de las partículas sea el correcto. Este segundo método consiste en ajustar en los cálculos de campo medio el número de partículas a un valor tal, que después de proyectar se obtiene el valor del número de partículas buscado.

Comparación en los métodos de reajuste del número de partículas

Se han realizado estudios de comparación de los dos métodos anteriores para el isótopo ^{229}Ra .

De acuerdo con la figura 7.5, los dos métodos de reajuste del número de partículas ΔN dan básicamente el mismo resultado. Así que debido a la sencillez del primer método, ha sido éste elegido para ser aplicado en todos los cálculos de correlaciones octupolares.

Casos particulares de la proyección a buena paridad Para el límite $Q_{30} \rightarrow 0$, ya se vio que se puede deducir la forma del operador densidad. A continuación se muestran los casos concretos de dichos límites.

1) Si el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad positiva y se realiza una proyección a paridad positiva, según la expresión obtenida para el operador densidad, los valores esperados deben ser los mismos que se obtienen en la EFA.

$$\hat{\mathcal{D}}_{\pi=+1}^{qp:+1} = \frac{1}{4} \{ |\phi\rangle \langle \phi| + \beta_\mu^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_\mu + \beta_\mu^\pm |\phi\rangle \langle \phi| \beta_{\bar{\mu}} + \beta_\mu^+ \beta_\nu^+ |\phi\rangle \langle \phi| \beta_\nu \beta_\mu \} \quad (7.8)$$

Ésto es lo que se observa en la figura 7.6 para la energía. En $Q_{30} = 0$ la energía EFA y la proyectada a a paridad positiva son iguales.

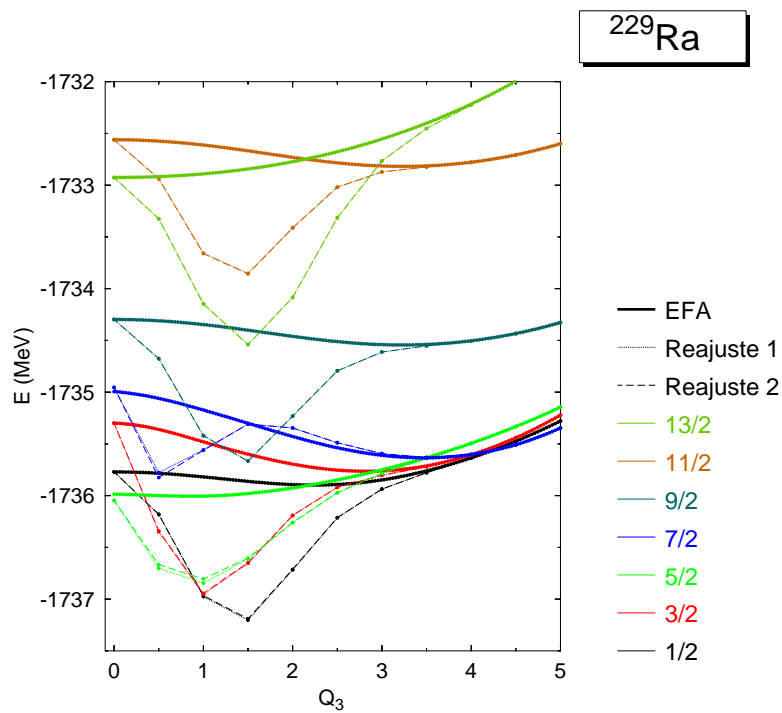


Figura 7.5: Comparación de los dos métodos de reajuste del número de partículas tras la proyección. En línea continua gruesa están representados los resultados de EFA. En línea fina continua se representan los resultados proyectados con método de reajuste 1 y en línea discontinua los del método 2. Todos los resultados proyectados corresponden a la proyección a paridad positiva.

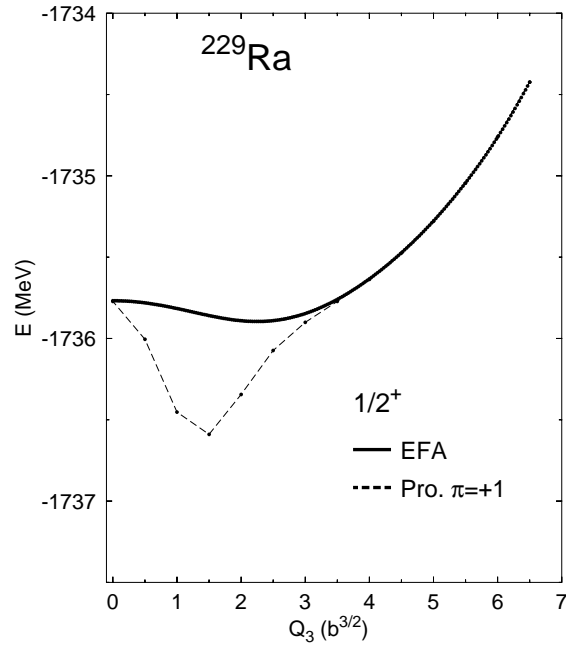


Figura 7.6: Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad positiva cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad positiva en el isótopo ^{229}Ra .

2) Si, por el contrario el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad negativa y se realiza una proyección a paridad positiva, la expresión del operador densidad indica que se obtendrá el mismo resultado que si se realizara una proyección a paridad de número +1, es decir se mantienen únicamente las contribuciones con número par de cuasipartículas.

$$\hat{\mathcal{D}}_{\pi=+1}^{qp:-1} = \frac{1}{2} (|\phi\rangle \langle\phi| + \beta_{\mu}^{+} \beta_{\nu}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\nu} \beta_{\mu}) \quad (7.9)$$

En la figura 7.6 se observa este hecho para el caso de la energía. Para $Q_{30} = 0$ la energía proyectada a paridad positiva y la energía proyectada a paridad de número positiva deben ser iguales.

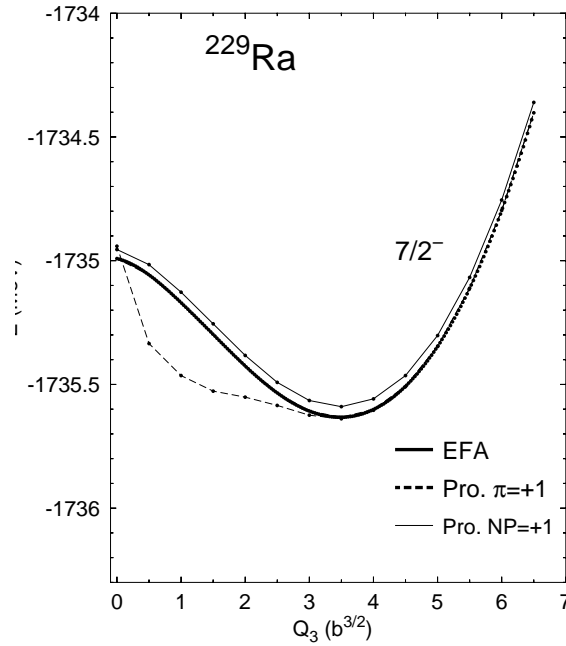


Figura 7.7: Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad positiva cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad negativa para el isótopo ^{229}Ra .

3) Si el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad positiva y se realiza una proyección a paridad negativa, el operador densidad obtenido tiene una divergencia $\frac{0}{0}$. Ésto significa que el valor esperado de cualquier operador será diferente que el obtenido en EFA, y se espera que mayor.

$$\hat{\mathcal{D}}_{\pi=-1}^{qp:+1} = \frac{0}{0} \quad (7.10)$$

En la figura 7.8 se observa este comportamiento para la energía. En $Q_{30} = 0$ la energía proyectada a paridad negativa da un valor muy alejado por encima de la energía EFA debido a la divergencia de $\hat{\mathcal{D}}_{\pi=-1}^{qp:+1}$.

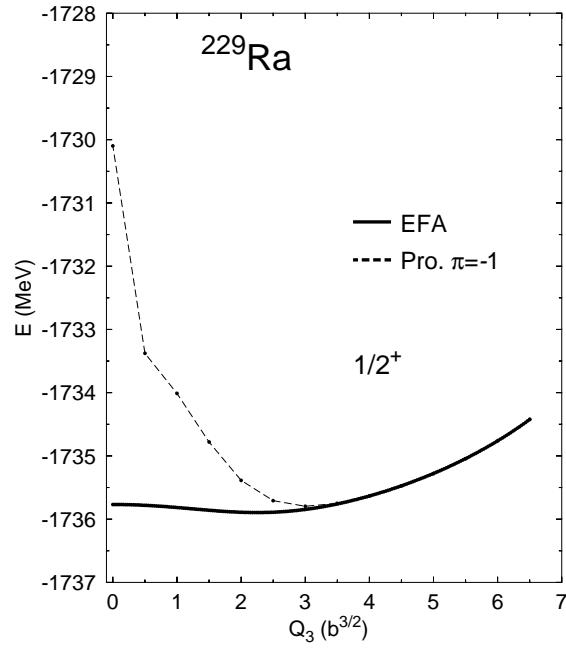


Figura 7.8: Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad negativa cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad positiva para el isótopo ^{229}Ra .

4) Por último cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad negativa y se realiza una proyección a paridad negativa, el valor esperado de cualquier operador no se mantendrá fijo, como podría pensarse, sino que toma el mismo valor que si se realizara la proyección a paridad de número negativo partiendo de la función de onda EFA.

$$\hat{D}_{\pi=-1}^{qp:-1} = \frac{1}{2} (\beta_{\mu}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\mu} + \beta_{\bar{\mu}}^{+} |\phi\rangle \langle\phi| \beta_{\bar{\mu}}) \quad (7.11)$$

En la figura 7.9 se observa lo que le ocurre a la energía. Cuando la paridad del estado bloqueado está bien definida, en $Q_{30} = 0$, la energía proyectada a paridad negativa da el mismo valor que la energía proyectada a paridad de número impar.

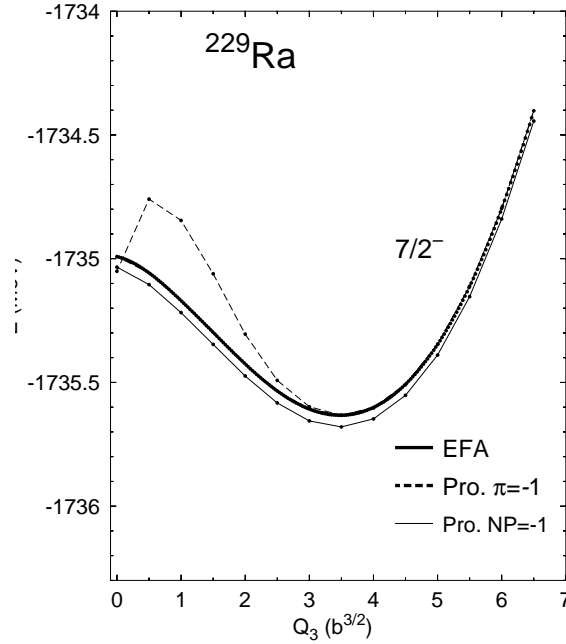


Figura 7.9: Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad negativa cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad negativa para el isótopo ^{229}Ra .

7.2.1. Isótopos del Radio

El isótopo que mejor representa la influencia de la técnica de la proyección a paridad sobre los cálculos de campo medio, sin duda es el ^{229}Ra . Las energías de correlación octupolar a nivel de campo medio EFA son muy pequeñas, siendo nulas para $j_z = \frac{5}{2}$ y $j_z = \frac{3}{2}$ y máximas (500 keV) para $j_z = \frac{7}{2}$. Al aplicar la proyección todas las configuraciones sufren cambios importantes en sus energías a excepción de $j_z = \frac{7}{2}$ que mantiene el mismo mínimo que en EFA. Aunque ya en campo medio EFA, todas las superficies de energía potencial encuentran su mínimo en un valor del momento octupolar no nulo, tras la proyección, la deformación octupolar toma valores más pequeños. En la figura 7.10 se muestran los resultados HFB-EFA y los de proyección a paridad positiva, que son los que mejoran la descripción. Antes de nada hay que decir que en todos los espectro resultantes del cálculo EFA los niveles están denotados por su espín y paridad. Cuando dichas paridades están rotas aparece el símbolo # y a su lado se muestra la paridad de ese mismo estado para $Q_{30} = 0$. Para ver que comportamiento tiene la proyección a paridad positiva y negativa, en la figura 7.11 se muestran ambos conjuntos de resultados, así como los de EFA.

El efecto de la proyección a paridad positiva se produce para el rango del momento octupolar $Q_{30} : 0 - 2b^{3/2}$ o lo que es lo mismo deformación octupolar $\beta_3 : 0 - 0,064$. El enorme cambio en la energía obtenida (en algunos casos llega hasta los 800 keV) provoca un cambio en el orden de los niveles en el espectro con respecto al obtenido con la EFA. A nivel de campo medio $j_z = \frac{5}{2}$, con deformación octupolar cero, era el estado fundamental que se obtenía, valor que coincide con el experimental, pero tras la proyección es el nivel $j_z = \frac{1}{2}$ con momento octupolar $Q_{30} = 1,5b^{3/2}$ el que tiene la energía más baja. La figura 7.12 muestra el espectro resultante con las configuraciones que generan las mínimas energías a nivel de

campo medio, tras la proyección y en la gráfica de la derecha el espectro experimental. La mayor diferencia entre la energía de EFA y la proyectada se encuentra en $Q_{30} = 1b^{3/2}$ que corresponde a $\beta_3 = 0,032$.

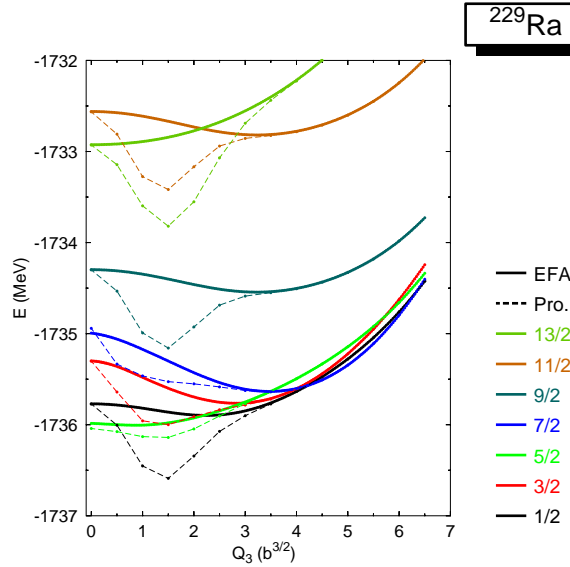


Figura 7.10: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.11.

Existe otro tipo de caso donde, aunque la proyección aporta cambios en los mínimos de todas o de algunas configuraciones, el espectro de niveles se mantiene sin grandes cambios. Ésto es lo que ocurre con el ^{231}Ra . Apenas existen correlaciones octupolares a nivel de campo medio. Sólo para $j_z = \frac{3}{2}$ y $j_z = \frac{5}{2}$ hay un pequeño pozo de potencial, mientras que el resto de estados tienen su mínimo en $Q_{30} = 0$. Tras la proyección la energía llega a valores más profundos. El cambio en la energía proyectada se produce en el rango $Q_{30} : 0 - 2.5b^{3/2}$. La mayor diferencia entre la energía de EFA y la proyectada se encuentra para unas configuraciones en $Q_{30} = 1b^{3/2}$, $\beta_3 = 0.031$, y en otras configuraciones en $Q_{30} = 1.5b^{3/2}$. Las energías de correlación en las distintas configuraciones varían entre 150 keV para el $j_z = \frac{7}{2}$ y de 1 MeV para $j_z = \frac{13}{2}$. Aun así el orden de los niveles no sufre alteraciones, lo que sí cambia es la energía entre los estados, como se puede ver en la figura 7.13 en la que están dibujados los resultados de campo medio EFA y de la proyección a buena paridad. La figura 7.14 muestra los resultados de las superficies de energía potencial proyectada. En la figura 7.15 se pueden ver los espectros resultantes obtenidos con la EFA y con la proyección, así como el espectro experimental [55]. El estado fundamental proyectado predicho es un $j_z^\pi = \frac{1}{2}^+$ que aparece como primer estado excitado del espectro experimental. Y el primer estado excitado del espectro proyectado es un $j_z^\pi = \frac{5}{2}^+$ que es el estado fundamental experimental.

De igual forma se comporta el ^{225}Ra donde sólo las configuraciones $j_z = \frac{5}{2}$ y $j_z = \frac{13}{2}$ modifican su deformación octupolar consiguiendo un mínimo más profundo. Éstos cambios entre la energía de campo medio y la energía proyectada se observan en el rango $Q_{30} : 0 - 2b^{3/2}$, donde la mayor diferencia entre la energía de EFA y la proyectada se encuentra

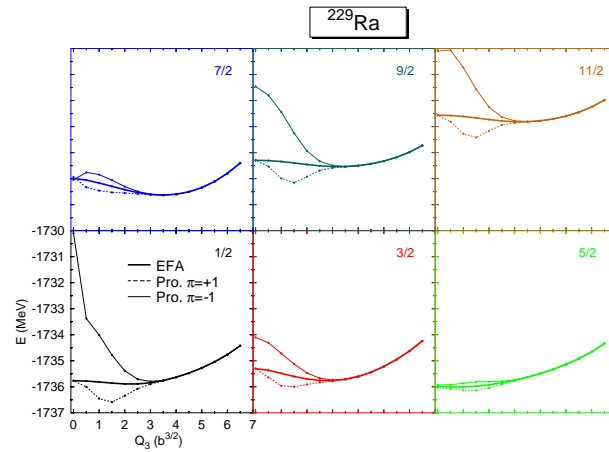


Figura 7.11: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.10.

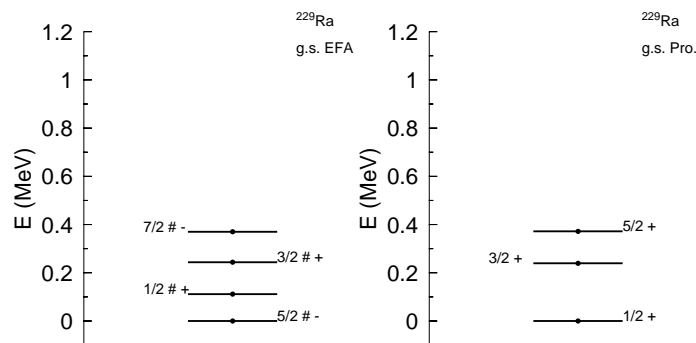


Figura 7.12: Espectros del núcleo ^{229}Ra . A la izquierda se muestra el espectro teórico HFB-EFA y a la derecha el espectro tras la proyección. De este isótopo sólo se conoce su estado fundamental $\frac{5}{2}^+$.

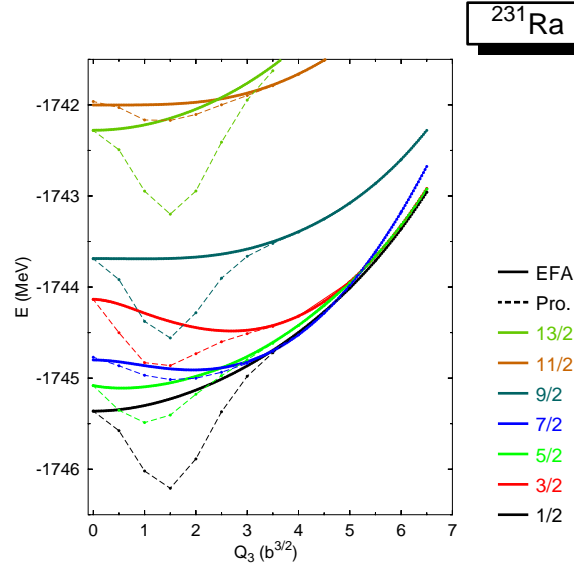


Figura 7.13: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.14.

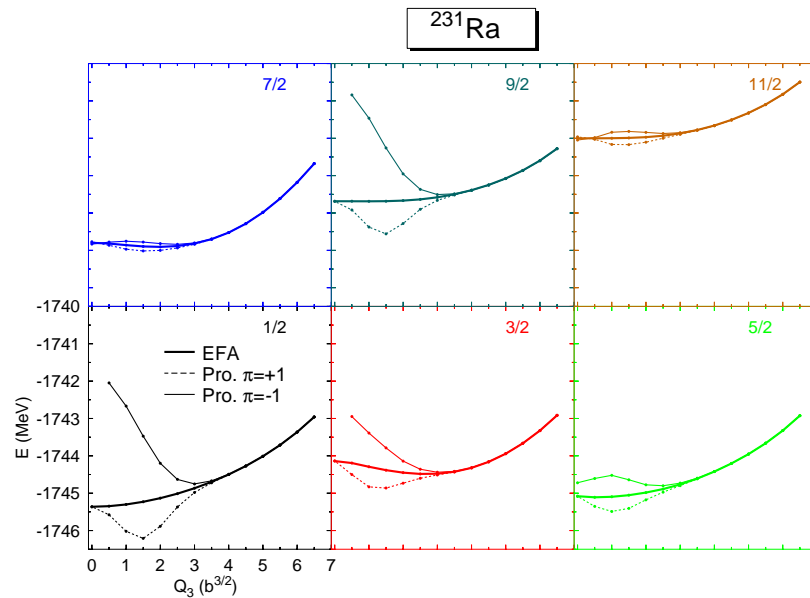


Figura 7.14: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.13.

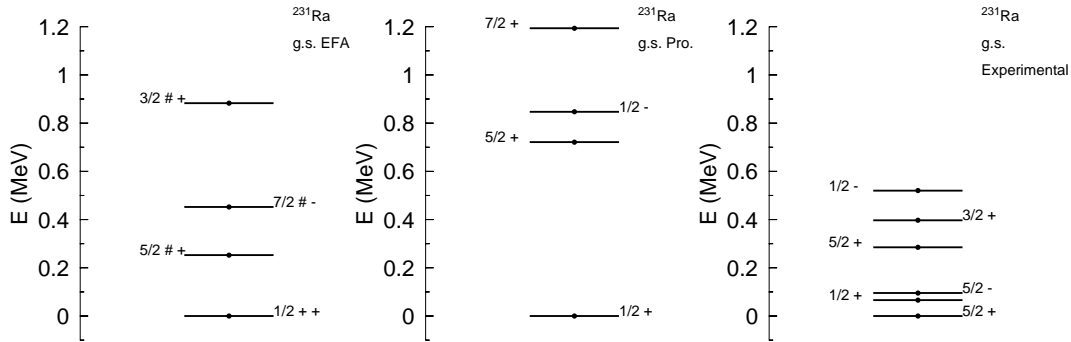


Figura 7.15: Espectros del núcleo ^{231}Ra . A la izquierda se muestra el espectro teórico HFB-EFA, en el centro está el espectro tras la proyección y a la derecha se muestra el obtenido experimentalmente.

en la deformación $Q_{30} = 1b^{3/2}$. Ésto se puede ver en las figuras 7.16 y 7.17. Aparece, por tanto, un pequeño cambio en el orden del espectro que produce un cruce entre los estados $j_z = \frac{11}{2}$ y $j_z = \frac{13}{2}$ tal cual se muestra en la figura 7.18. En cuanto al acuerdo con los niveles experimentales [55], de nuevo se han predicho los mismos estados experimentales aunque con pequeños cambios. Se obtienen los mismos estados $\frac{1}{2}^+$ y $\frac{1}{2}^-$ degenerados como estados fundamentales, seguido de los estados $\frac{3}{2}^-$, $\frac{3}{2}^+$ y $\frac{5}{2}^+$.

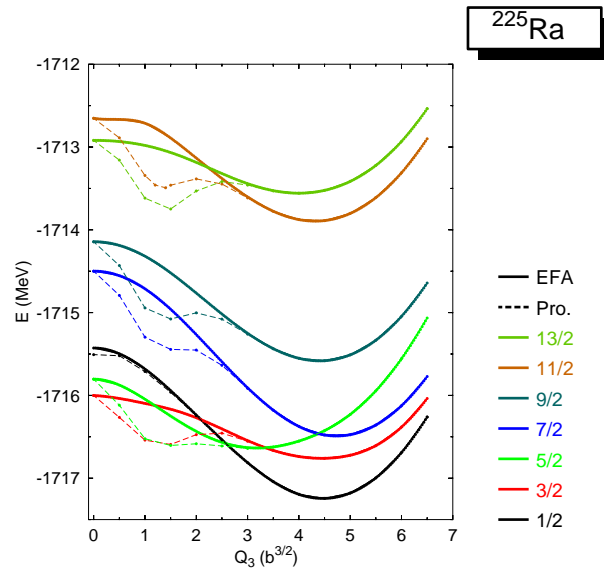


Figura 7.16: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.17.

Otro isótopo con este mismo tipo de comportamiento es el ^{227}Ra , donde se modifica el mínimo de la configuración $j_z = \frac{5}{2}$ llegando a situarse como el estado fundamental: figuras 7.19 y 7.20. El efecto de la técnica de proyección de la paridad aparece en el rango $Q_{30} : 0 - 2b^{3/2}$, encontrándose la mayor diferencia entre la energía de EFA y la proyectada en $Q_{30} = 1b^{3/2}$. Gracias a este cambio se logra obtener el mismo estado fundamental que el

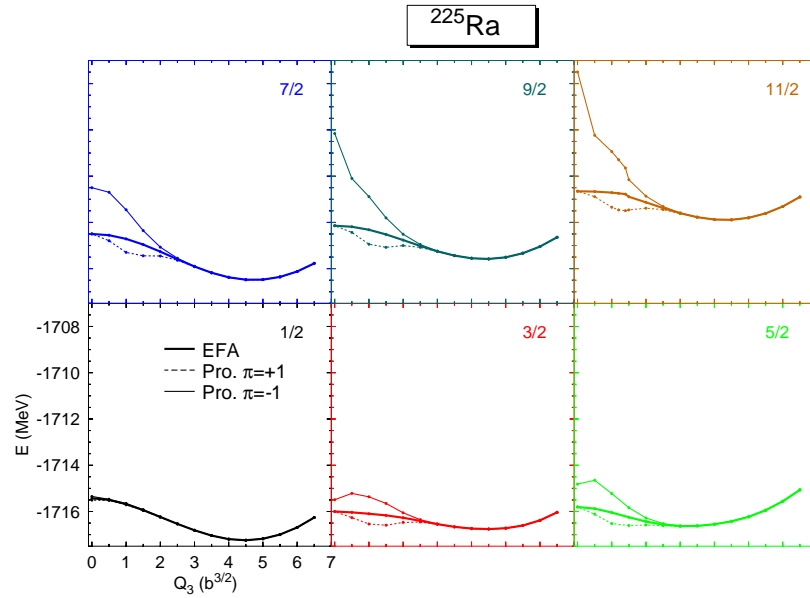


Figura 7.17: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.16.

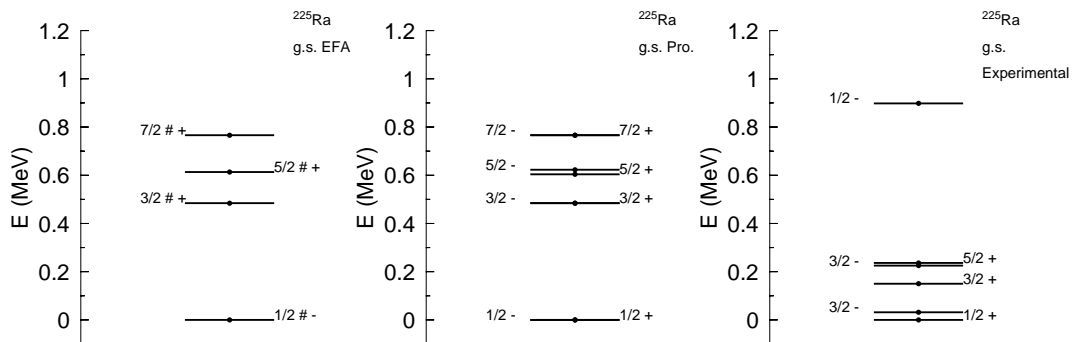


Figura 7.18: Espectros del núcleo ^{225}Ra . Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente.

obtenido experimentalmente [55], figura 7.21. También los tres primeros estados excitados se reproducen con igual orden.

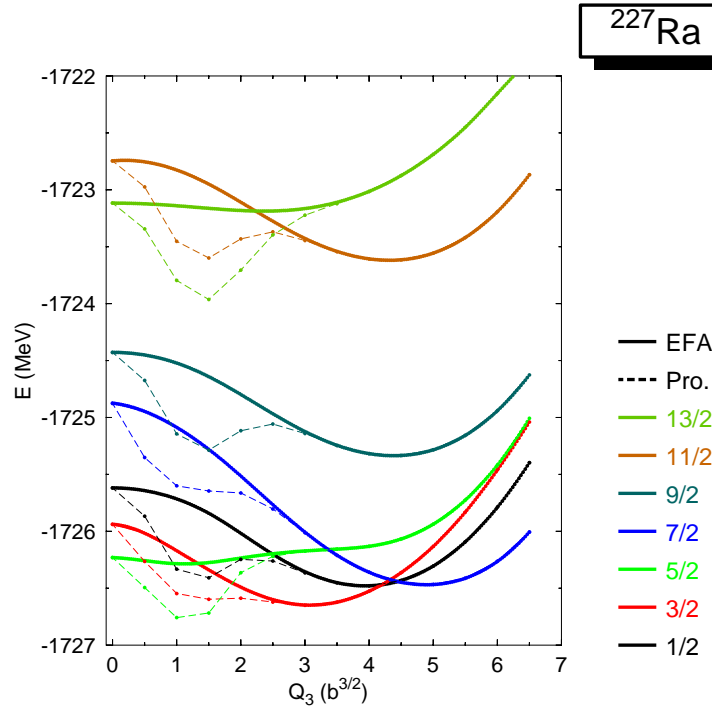


Figura 7.19: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.20.

Por último están los isótopos ^{221}Ra , ^{223}Ra , donde la proyección no llega a modificar la estructura de niveles y tanto a nivel de campo medio como después de proyectar, el espectro de niveles es el mismo. Ésto se ve en las figuras 7.22 y 7.23, para el primer isótopo estudiado ^{221}Ra . El efecto de la proyección se observa en $Q_{30} : 0 - 2b^{3/2}$.

De las gráficas de las superficies de energía potencial del ^{221}Ra se puede deducir el espectro de estados, representado en la figura 7.2.1. Comparándolo con el espectro experimental, se observa un buen acuerdo, ya que aunque están predichos como degenerados y los datos experimentales [55] los dan separados, los estados más bajos del espectro son los niveles $\frac{5}{2}^+$ y $\frac{5}{2}^-$. También hay que notar que el siguiente nivel experimental es un $\frac{3}{2}^+$ que también aparece en las predicciones a 500 keV del estado fundamental.

De las figuras 7.28, 7.26 y 7.27 se puede ver que el mínimo proyectado coincide con el mínimo que se obtiene a nivel de campo medio. De todas las curvas se extrae el espectro de estados de la figura 7.28.

Momentos dipolares

Una magnitud cuántica importante que caracteriza al núcleo es la probabilidad de transición entre distintos estados. Para el fenómeno de la octupolaridad, la transición de

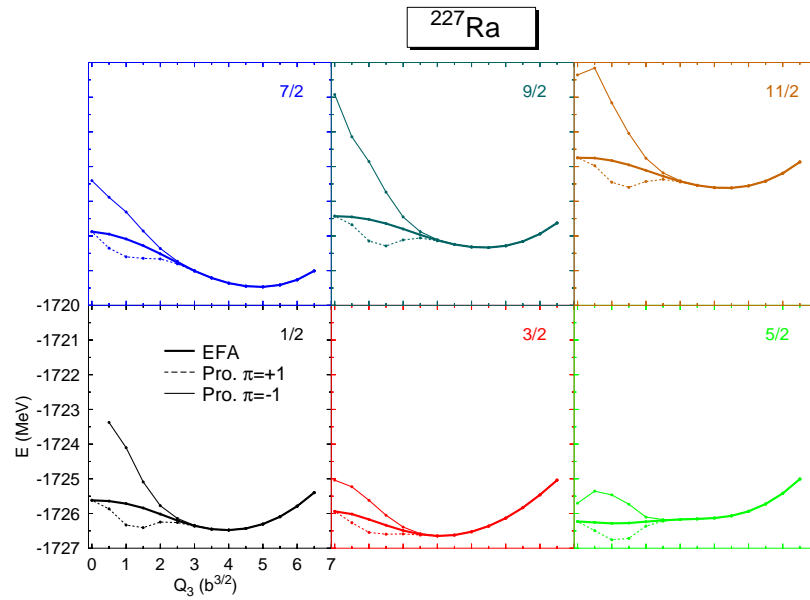


Figura 7.20: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.19.

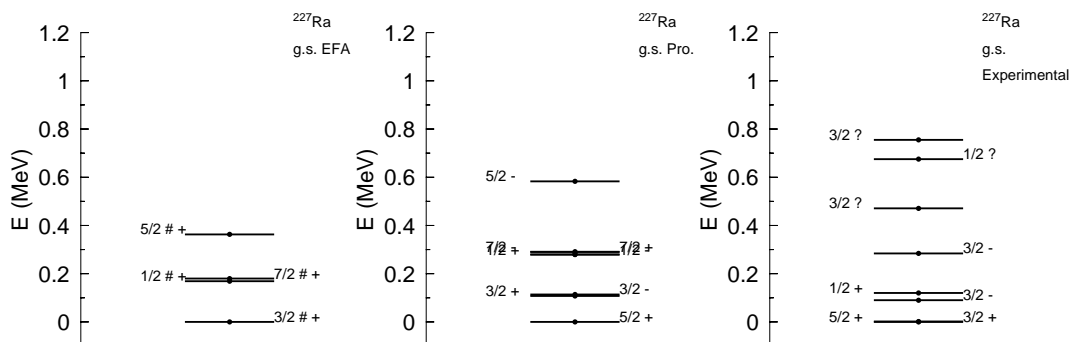


Figura 7.21: Espectro de niveles del núcleo ^{227}Ra . Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente.

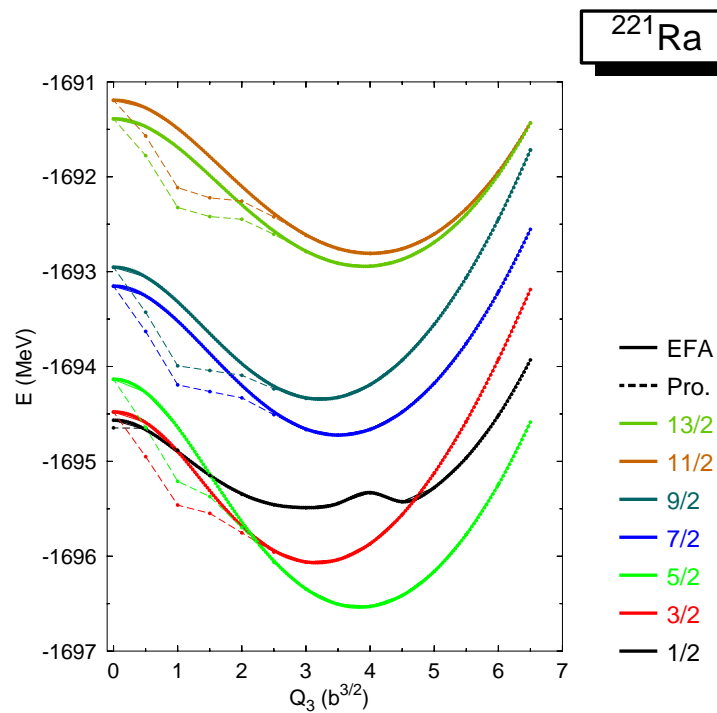


Figura 7.22: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.23.

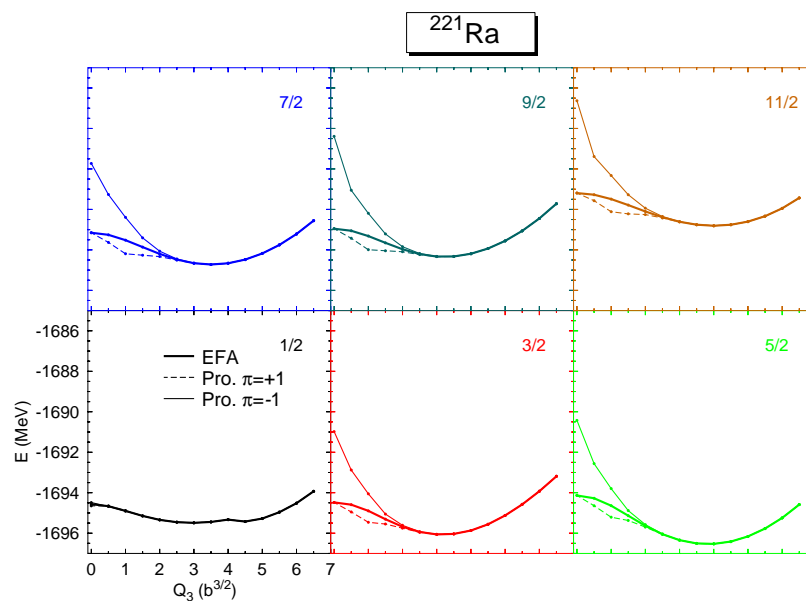


Figura 7.23: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.22.

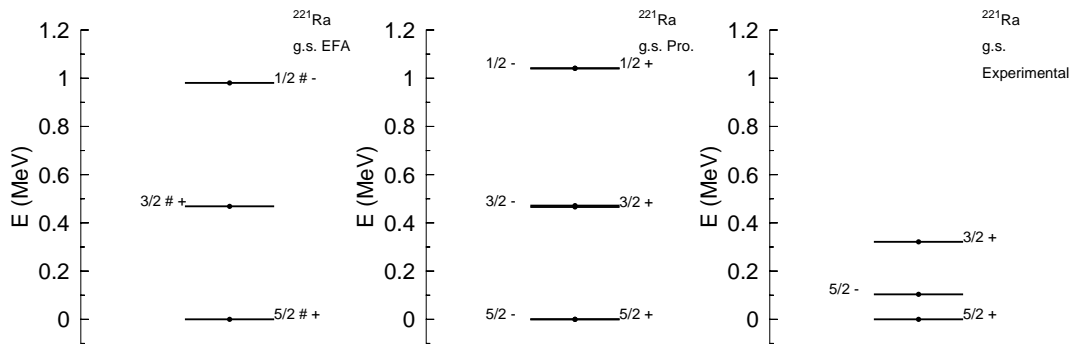


Figura 7.24: Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{221}Ra .

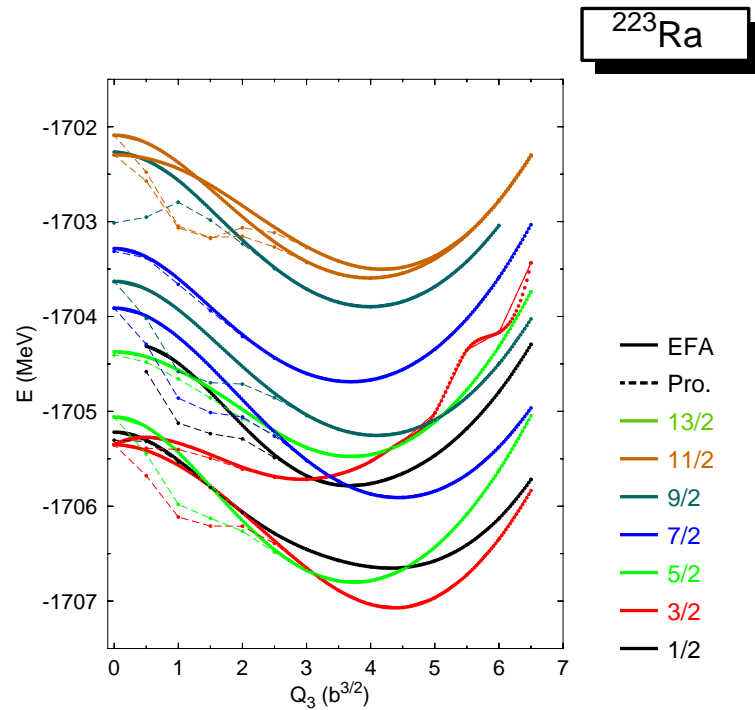


Figura 7.25: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Ra bloqueando los dos primeros estados de cada j_z . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver las figuras 7.26 y 7.27.

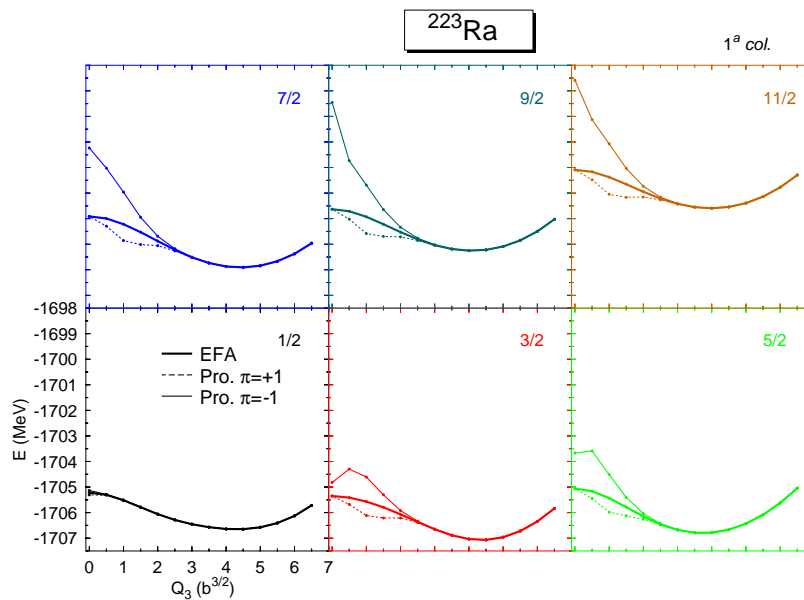


Figura 7.26: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Ra bloqueando el primer estado de cada j_z incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.25.

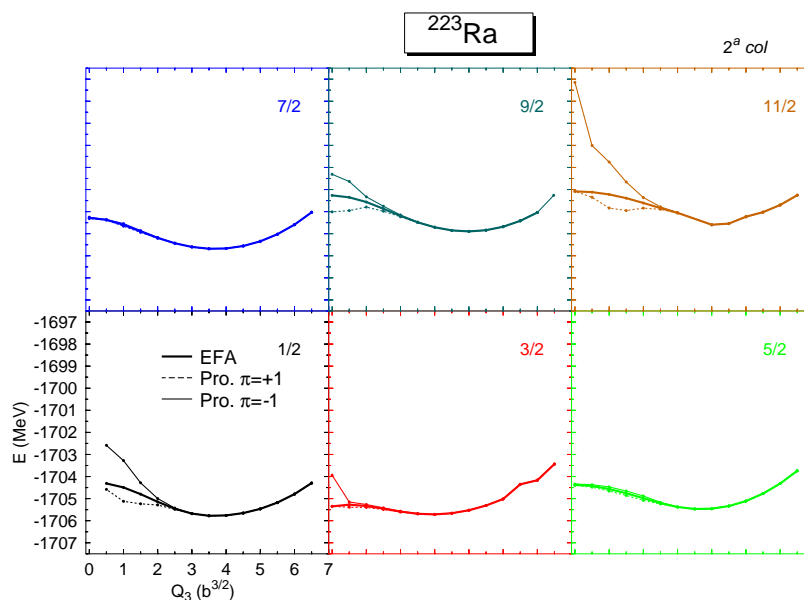


Figura 7.27: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Ra bloqueando el segundo estado de cada j_z incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.25.

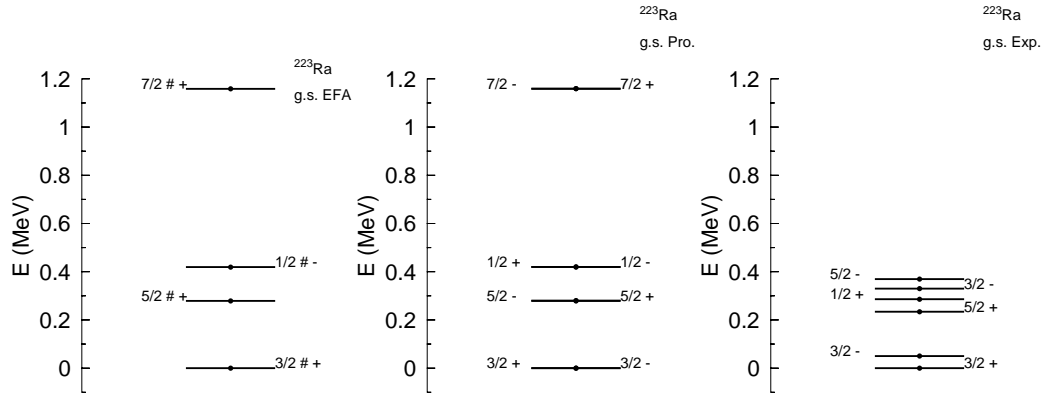


Figura 7.28: Espectro del núcleo ^{223}Ra . A la izquierda se muestra el espectro teórico HFB-EFA, en el centro está el espectro tras la proyección y a la derecha el obtenido experimentalmente.

probabilidad dipolar eléctrica es la más relevante, por lo que conviene evaluar su magnitud. El momento dipolar eléctrico indica cuan probable es que se produzca una transición E1 entre dos estados. Esta magnitud también se puede asociar con el desplazamiento que existe entre el centro de carga y el centro de masa del núcleo, aunque este segundo significado está basado en un modelo colectivo y es menos riguroso. Su valor se puede calcular como la diferencia:

$$D = e \frac{ZN}{A} (R_Z - R_N) \quad (7.12)$$

donde $R_Z = \frac{r_Z}{Z}$ y $R_N = \frac{r_N}{N}$ son los centros de masas para protones y neutrones respectivamente. Debido a las simetrías impuestas en los cálculos, sólo la componente z de D da una contribución distinta de cero. Esta contribución se puede calcular con la función de onda de paridad mezclada ($D_o = \langle \phi | \hat{D}_z | \phi \rangle$).

La relación que existe entre la probabilidad de transición E1 y el momento dipolar es:

$$B(E1; I \rightarrow I - 1) = \frac{3Ie^2}{4\pi(2I + 1)} |\langle \phi | D | \phi \rangle|^2 \quad (7.13)$$

En concreto para la transición $1^- \rightarrow 0^+$, la probabilidad de transición es:

$$B(E1; 1^- \rightarrow 0^+) = \frac{e^2}{4\pi} |\langle \phi | D | \phi \rangle|^2 \quad (7.14)$$

En la figura 7.29 se muestran los valores del momento dipolar extraídos de los resultados proyectados para tener una idea de cuál es la probabilidad de transición E1 en cada isótopo. De ahí se puede deducir que cuando no hay deformación octupolar, el centro de carga corresponde al centro de masas, lo cual se debe a que no hay asimetría de reflexión en la distribución de carga y masa. A medida que el núcleo va adquiriendo mayor grado de octupolaridad, el desplazamiento entre el centro de carga y centro de masa se va haciendo

más patente. En algunos casos este desplazamiento se dirige hacia valores positivos de z y en otros hacia valores negativos de z . En la gráfica superior izquierda, que corresponde al ^{223}Ra , se ve cómo el momento dipolar aumenta al aumentar el momento octupolar; en la gráfica superior derecha, ^{225}Ra , hay una fase inicial en la que disminuye el momento dipolar, pero que luego repunta hacia valores positivos. Por último en la gráfica inferior, ^{231}Ra , la tendencia del momento dipolar es de ir hacia valores negativos.

Ésto da pie a pensar que hay una transición de fase al hacer un barrido desde el isótopo más ligero, ^{221}Ra , hasta el más pesado, ^{231}Ra , en el que el momento dipolar eléctrico va disminuyendo pasando de valores positivos a negativos gradualmente. En la cuadro 7.2 se pueden ver sus valores para los estados fundamentales y primeros excitados de cada isótopo.

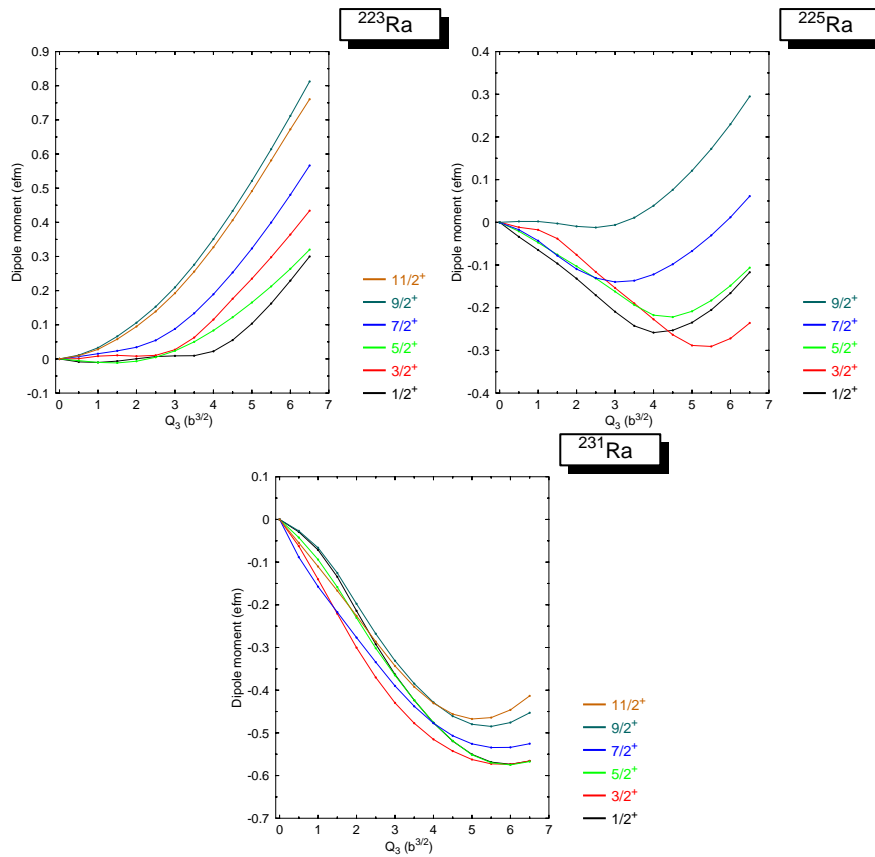


Figura 7.29: Comportamientos del momento dipolar en función del momento octupolar para los isótopos ^{223}Ra , ^{225}Ra y ^{231}Ra .

Según los resultados experimentales [28] los momentos dipolares ^{221}Ra 0.36 efm, ^{223}Ra 0.12 efm y ^{225}Ra 0.15 efm. Los resultados del ^{221}Ra son para espín mayor que $7\hbar$, mientras que para ^{223}Ra y ^{225}Ra los resultados son para espín menor que $7\hbar$. Si se comparan estos datos con los resultados del cuadro 7.2 se encuentra una tendencia común. A medida que los isótopos son más pesados, el momento dipolar disminuye [4].

^{221}Ra			^{223}Ra			^{225}Ra		
	j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar
g.s.	$\frac{5}{2}^+$	0.427	g.s.	$\frac{3}{2}^+$	0.176	g.s.	$\frac{1}{2}^+$	-0.253
1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	0.255	1 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^+$	0.050	1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	-0.263
2 ^o exc.	$\frac{1}{2}^+$	0.262	2 ^o exc.	$\frac{1}{2}^+$	0.551	2 ^o exc.	$\frac{5}{2}^+$	-0.162
3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	0.403	3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	0.253	3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	-0.098

^{227}Ra			^{229}Ra			^{231}Ra		
	j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar
g.s.	$\frac{5}{2}^+$	-0.042	g.s.	$\frac{1}{2}^+$	-0.141	g.s.	$\frac{1}{2}^+$	-0.134
1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	-0.275	1 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^+$	-0.127	1 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^+$	-0.094
2 ^o exc.	$\frac{1}{2}^+$	-0.412	2 ^o exc.	$\frac{3}{2}^+$	-0.182	2 ^o exc.	$\frac{1}{2}^-$	0.000
3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	-0.470	3 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^-$	0.000	3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	-0.217

Cuadro 7.2: Resultados del momento dipolar para todos los isótopos de Radio estudiados. En la segunda fila de cada cuadro están los resultados del espín, paridad y momento dipolar para el estado fundamental; en las filas siguientes aparecen los resultados de los tres primeros estados excitados.

7.2.2. Isótopos de Torio

El comportamiento de las energías proyectadas para los isótopos de Torio estudiados es diferente en cada caso. Se pueden distinguir tres patrones: uno en el que la energía proyectada mejora respecto a los resultados EFA, encontrando nuevos mínimos de energía que varían el espectro de niveles; éste es el caso de los isótopos ^{231}Th y ^{229}Th . Otro modelo es en el que sólo algunas configuraciones mejoran los mínimos de energía adquiriendo otros valores de la deformación octupolar. Los representantes de este modelo son el ^{227}Th y ^{221}Th . Por último el caso en que, aunque en algunos rangos de deformación octupolar la energía proyectada queda debajo de la energía EFA, el mínimo absoluto sigue siendo el mismo que se encontró a nivel de campo medio EFA. Así se comportan el ^{225}Th y ^{223}Th . A continuación se presentan estos análisis con más detalle.

Casos como el del isótopo ^{231}Th son los que demuestran la importancia de la restauración de la simetría de paridad a través de las técnicas de proyección. Mientras que a nivel de campo medio la mayoría de las configuraciones obtiene sus mínimos para momento octupolar cero (las que presentan deformación octupolar distinta, $j_z = \frac{7}{2}$ y $j_z = \frac{3}{2}$, rebajan en pocos keV de energía su mínimo), los resultados proyectados consiguen una rebaja de hasta 800 keV gracias a las energías de correlación octupolar. La excepción viene de la configuración $j_z = \frac{7}{2}$, que es la única que mantiene su mínimo tal cual se obtuvo a nivel de campo medio EFA. En la figura 7.30 se pueden ver los cambios provocados por la proyección a paridad positiva que es la que genera el mínimo más profundo. El comportamiento de la proyección a paridad negativa se puede ver en la figura 7.31 comparándolo con la paridad positiva y con la EFA. El efecto de la proyección se produce para el rango $Q_{30} : 0 - 2.5 b^{3/2}$ y la mayor diferencia entre la energía de EFA y la proyectada se encuentra para todas las configuraciones en $Q_{30} = 1.5 b^{3/2}$. El gran cambio en la energía obtenida (para $j_z = \frac{11}{2}$ y $j_z = \frac{13}{2}$ la reducción de energía llega hasta 0.8 MeV) provoca una modificación en el orden de los niveles en el espectro con respecto al obtenido con la EFA. A nivel de campo

medio $j_z = \frac{5}{2}$ con momento angular $Q_{30} = 1 b^{3/2}$, era el estado fundamental, valor que coincide con el experimental [55], pero tras la proyección es el nivel $j_z = \frac{1}{2}$ con momento octupolar $Q_{30} = 1,5 b^{3/2}$ el que tiene la energía más baja. En la figura 7.32 se muestra el espectro resultante con las configuraciones que generan las mínimas energías a nivel de campo medio, tras la proyección y en la gráfica de la derecha el espectro experimental.

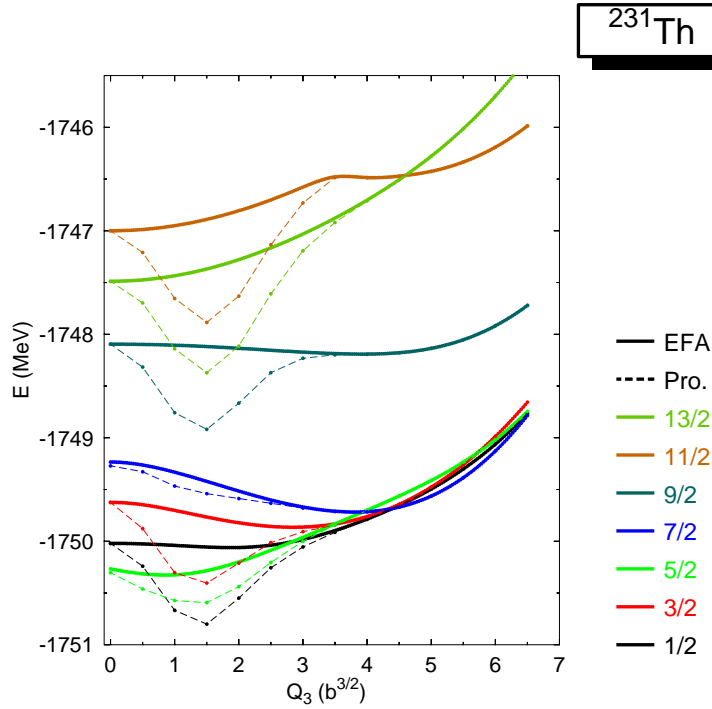


Figura 7.30: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.31.

Otro isótopo de comportamiento similar es el ^{229}Th . Aquí se repite la misma situación que para el ^{231}Th , incluido que todas las configuraciones obtienen mínimos más profundos al proyectar a excepción de $j_z = \frac{7}{2}$ que mantiene su mínimo tal cual se obtuvo a nivel de campo medio EFA. En la figura 7.33 se pueden ver los cambios que genera la proyección a paridad positiva que es la que da el mínimo más profundo. El comportamiento de la proyección a paridad negativa se puede ver en la figura 7.34 comparándolo con la paridad positiva y con la EFA. El orden de los niveles en el espectro sufre alteraciones con respecto al espectro del campo medio EFA. A nivel de campo medio $j_z = \frac{3}{2}$ con momento octupolar $Q_{30} = 3 b^{3/2}$, era el estado fundamental, pero tras la proyección el estado fundamental es el nivel $j_z = \frac{5}{2}$ con momento octupolar $Q_{30} = 1 b^{3/2}$ que aparece como estado fundamental del espectro experimental [55]. En la figura 7.35 se muestra el espectro resultante de campo medio, tras la proyección así como el espectro experimental.

Dentro del siguiente patrón de comportamiento está el ^{227}Th que viene caracterizado por las fuertes energías de correlación en los resultados EFA. Éstas varían entre 300 keV para el $j_z = \frac{13}{2}$ y 2.3 MeV para $j_z = \frac{7}{2}$. Motivado por la gran diferencia entre la solución con momento octupolar cero y con valores distintos de cero (en torno a $Q_{30} = 5 b^{3/2}$) la

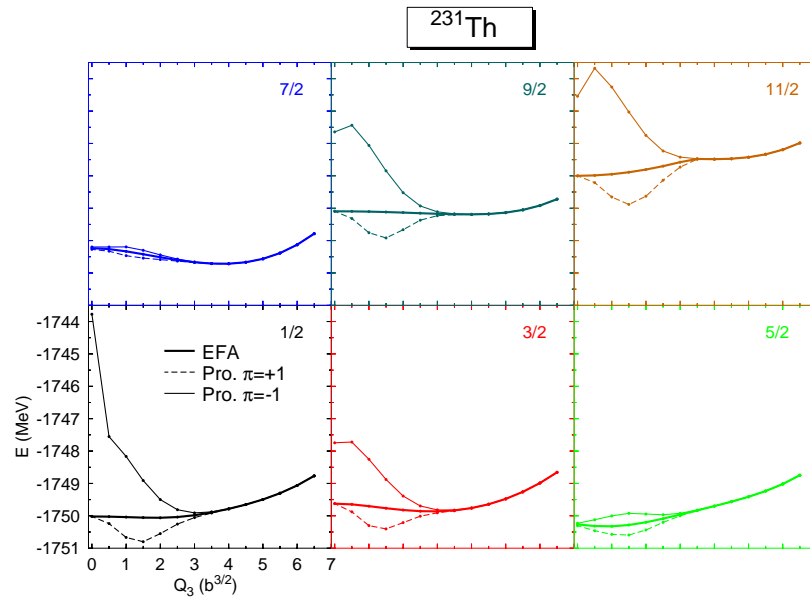


Figura 7.31: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.30.

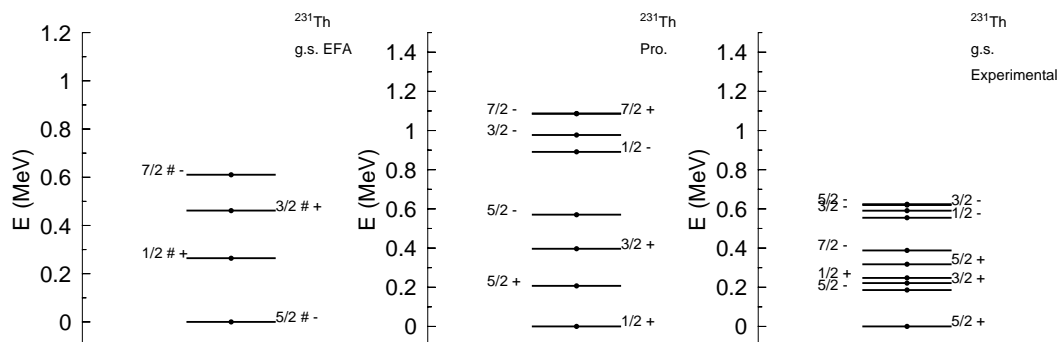


Figura 7.32: Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{231}Th .

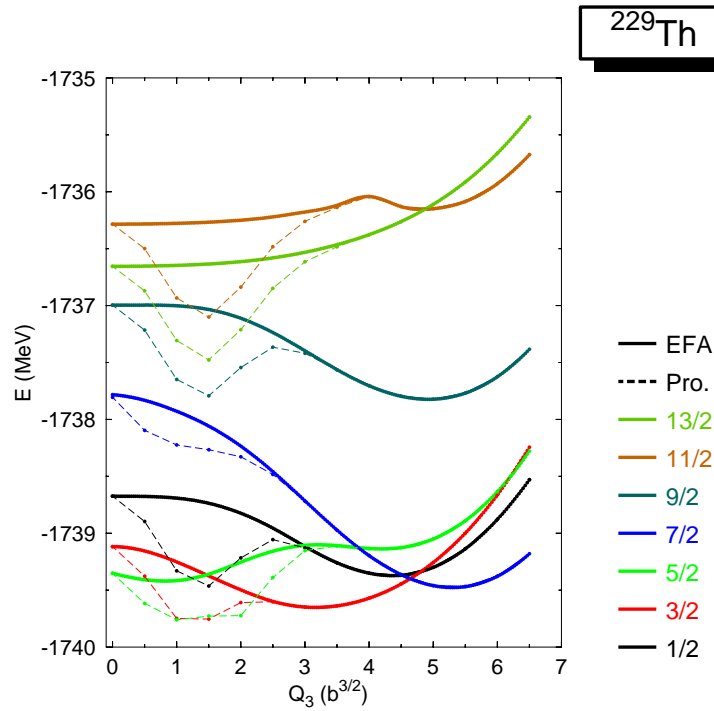


Figura 7.33: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.34.

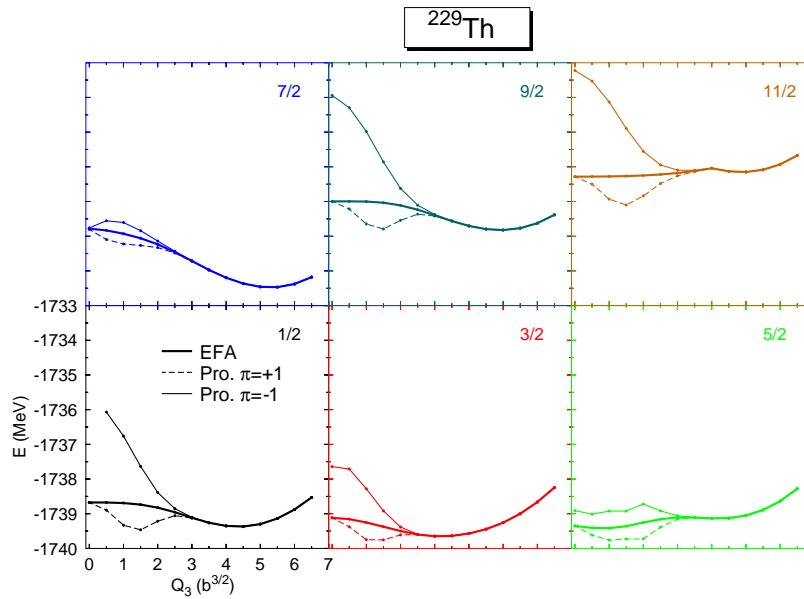


Figura 7.34: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.33.

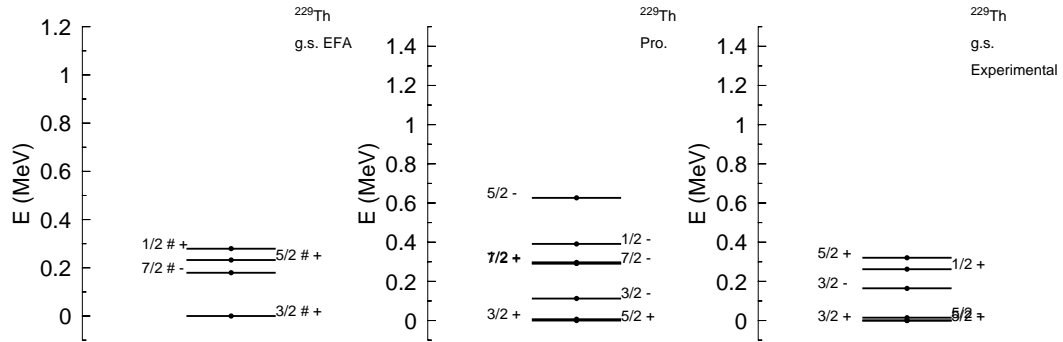


Figura 7.35: Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{229}Th .

aportación de la proyección a paridad no llega a ser tan grande como para generar un nuevo mínimo. En las figuras 7.36 y 7.37 se pueden ver estos hechos. Al deducir el espectro de niveles se observa un cambio en el mínimo de $j_z = \frac{3}{2}$ que consigue situarse como primer estado excitado por encima del $j_z = \frac{1}{2}$ que es el estado fundamental experimental [55]. El espectro experimental, el obtenido con EFA y el de la proyección a paridad se muestran en la figura 7.38.

Las configuraciones $j_z = \frac{1}{2}$ y $j_z = \frac{7}{2}$ como se ven en la figura 7.37 son casos particulares, donde el estado de cuasipartícula bloqueado tiene paridad negativa. Aquí se puede ver que al proyectar a paridad positiva una función de onda EFA que ha bloqueado un estado de paridad negativa, lo que en el fondo se está haciendo es proyectar a paridad de número par. Por el contrario al proyectar a paridad negativa esta misma función de onda, se realiza igualmente una proyección a paridad de número impar.

El ^{221}Th es el segundo caso para el patrón que obtiene mejoras en algunas configuraciones. En este isótopo se mezclan casos con mejora en la energía ($j_z = \frac{3}{2}, \frac{7}{2}$ y $\frac{9}{2}$) y configuraciones que se mantienen con el mismo mínimo que en EFA ($j_z = \frac{1}{2}, \frac{5}{2}, \frac{11}{2}$ y $\frac{13}{2}$). Los resultados EFA están todos caracterizados por una gran energía de correlación octupolar que toma valores entre 700 keV para $j_z = \frac{9}{2}$ y 1,7 MeV para $j_z = \frac{5}{2}$ y $\frac{11}{2}$. La proyección a paridad positiva es la que genera mínimos más profundos. Los resultados se muestran en la figura 7.39. El comportamiento de las dos proyecciones junto con los resultados de campo medio se pueden ver en la figura 7.40. $\frac{1}{2}$ es el momento angular predicho para el estado fundamental y $\frac{3}{2}^+$ para el primer estado excitado. Según los experimentos [55] es un $\frac{7}{2}$, que en los cálculos aparece a casi 2 MeV del fundamental. En la figura 7.41 se puede ver que el espectro de los resultados EFA y de los resultados proyectados son casi idénticos.

Con los isótopos ^{225}Th y ^{223}Th se cierran los modelos de comportamiento de la energía proyectada. En este último caso no existen novedades frente a las superficies de energía potencial que se obtuvieron en la aproximación EFA. Para el isótopo ^{225}Th las configuraciones $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$ y $\frac{9}{2}$ se mantienen igual. Por contra para $j_z = \frac{11}{2}$ y $j_z = \frac{13}{2}$ aparecen nuevos mínimos en la paridad positiva, aunque los más profundos siguen siendo los de campo medio. Estas configuraciones están muy alejadas del mínimo absoluto $j_z = \frac{3}{2}^+$, por lo que el espectro se mantiene como en EFA. Al igual que en ^{227}Th el motivo por el que la proyección no cambia mucho el espectro es debido a las grandes energías de correlación octupolar existentes a nivel de campo medio. Las dos configuraciones a las que más les

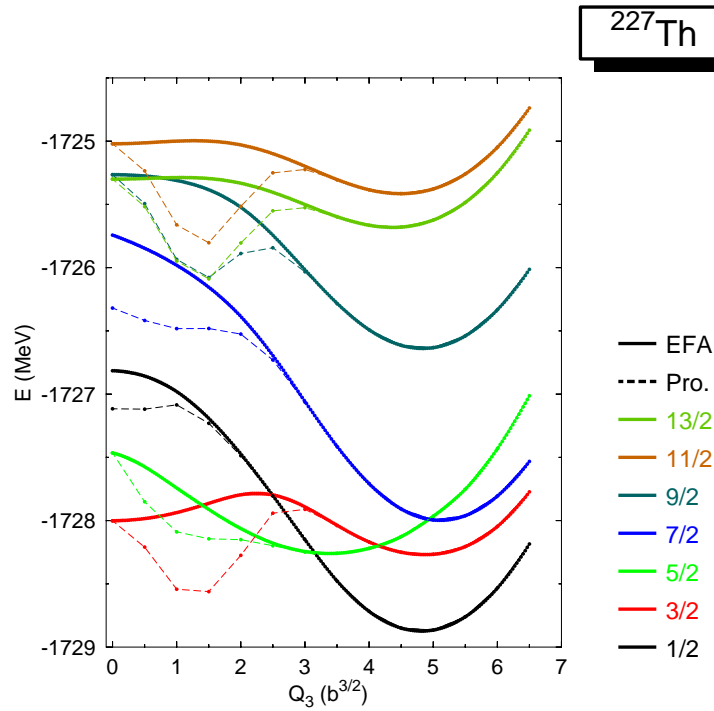


Figura 7.36: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.37.

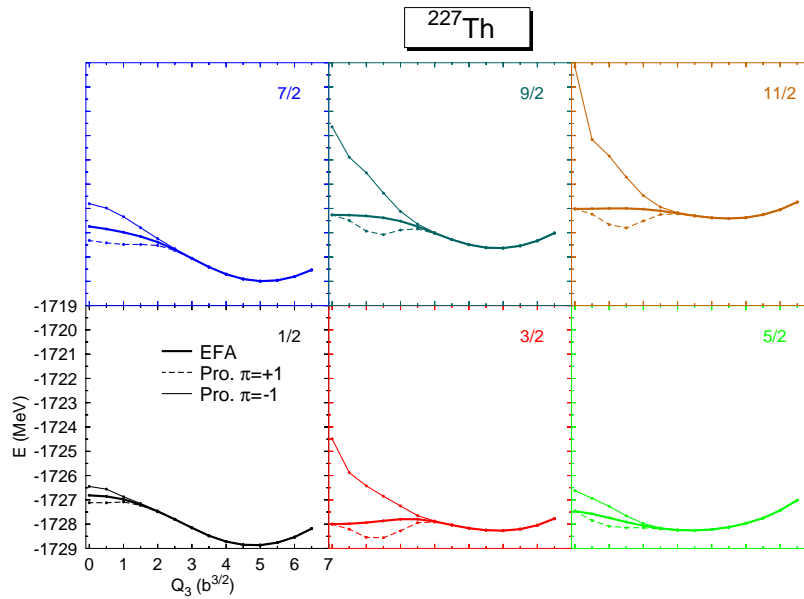


Figura 7.37: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.36.

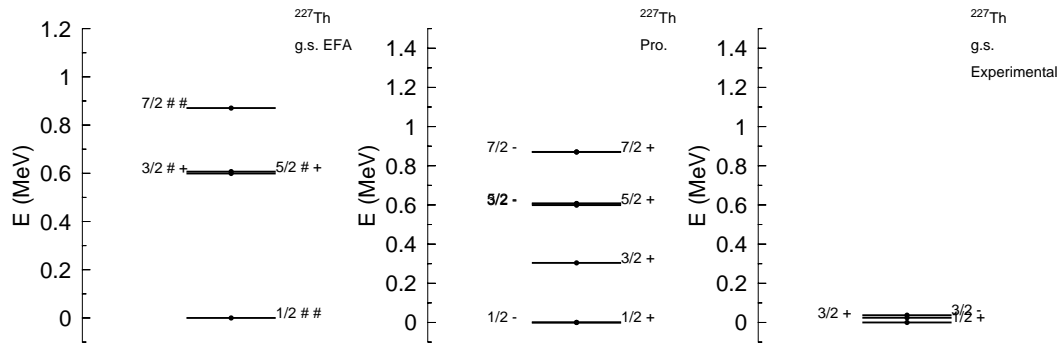


Figura 7.38: Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{227}Th .

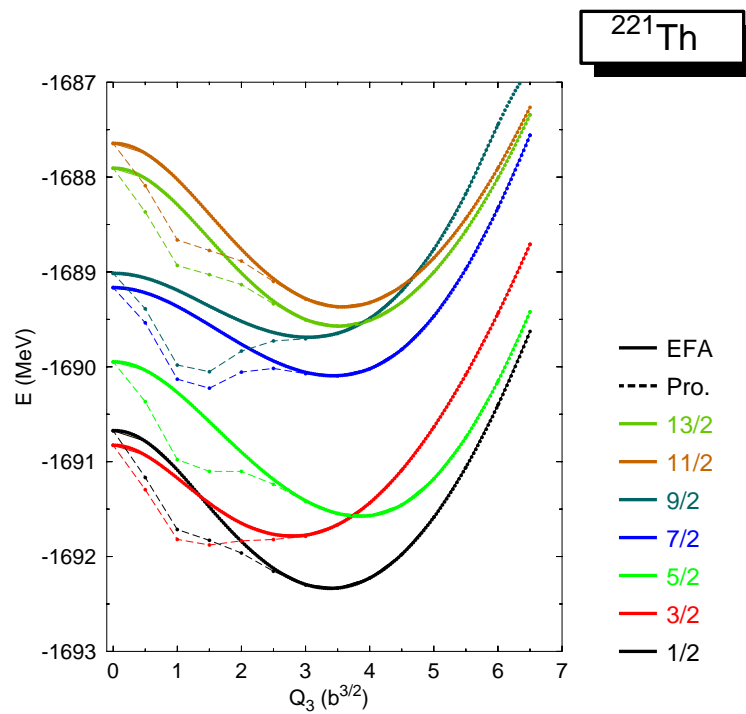


Figura 7.39: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.40.

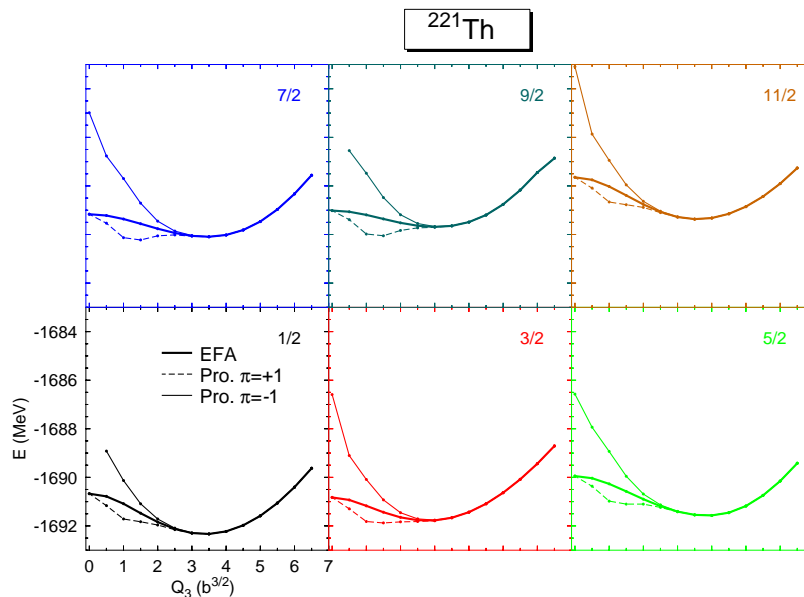


Figura 7.40: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.39.

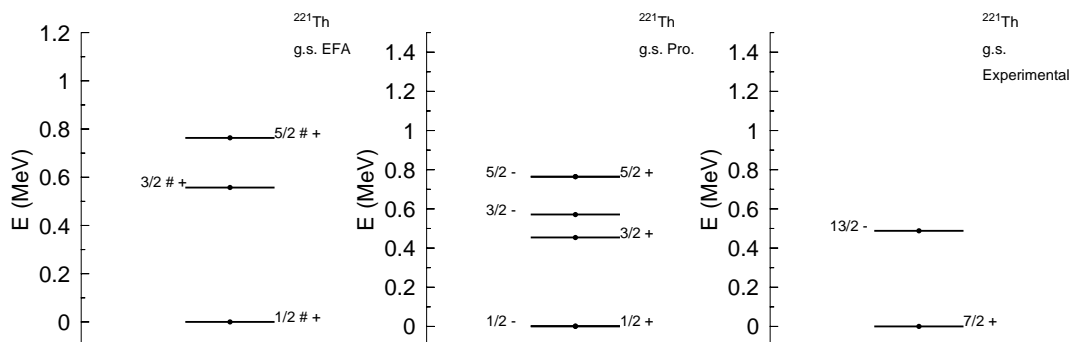


Figura 7.41: Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{221}Th .

afecta la proyección, $j_z = \frac{11}{2}$ y $j_z = \frac{13}{2}$, son las que menos energía de correlación octupolar tienen en campo medio, cerca de 700 keV. Mientras que para el resto de configuraciones las energías de correlación llegan a ser del orden de 2.5 MeV. Otra característica de estas dos configuraciones frente a las otras, es que el rango de modificación de la proyección sobre los resultados de campo medio se alarga hasta $Q_{30} = 3b^{3/2}$, y no hasta $2.5b^{3/2}$ como en los otros casos. Estas características se pueden ver en las figuras 7.42 y 7.43.

El estado fundamental predicho es $\frac{3}{2}^+/\frac{3}{2}^-$ y el primer estado excitado $\frac{5}{2}^+/\frac{5}{2}^-$. Según los datos experimentales [55] el estado fundamental es $\frac{3}{2}^+$, lo cual está de acuerdo con lo calculado. Los espectros obtenidos se pueden ver en la figura 7.44.

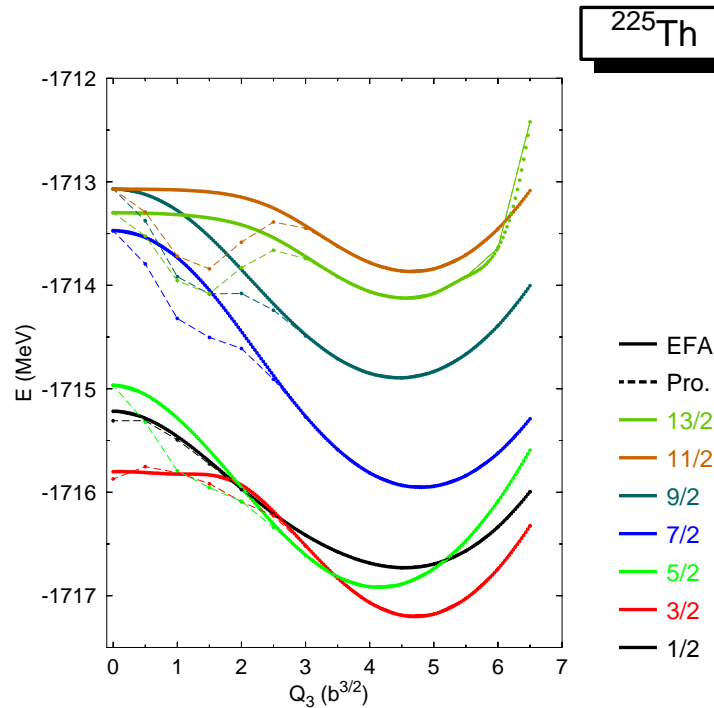


Figura 7.42: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Th . Los resultados de EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.43.

El isótopo ^{223}Th es el ejemplo en el que la energía proyectada apenas difiere de la energía de campo medio. Así se puede observar en la figura 7.45 que los mínimos en todas las configuraciones son los mismos para las dos técnicas (campo medio EFA y proyección). En la figura 7.46 se muestran las dos curvas de proyección a paridad positiva y negativa, junto con los resultados de campo medio EFA.

El estado fundamental predicho por la teoría es $\frac{5}{2}^+/\frac{5}{2}^-$ que coincide con el experimental [55]. El primer estado excitado experimental es el $\frac{9}{2}^-$ que en la teoría aparece a casi 2 MeV del fundamental. Todo ello se observa en la figura 7.47.

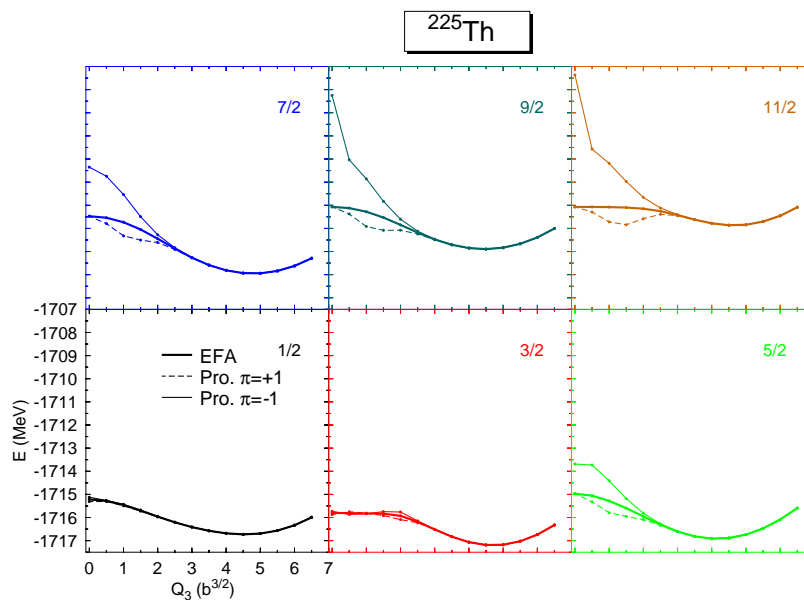


Figura 7.43: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.42.

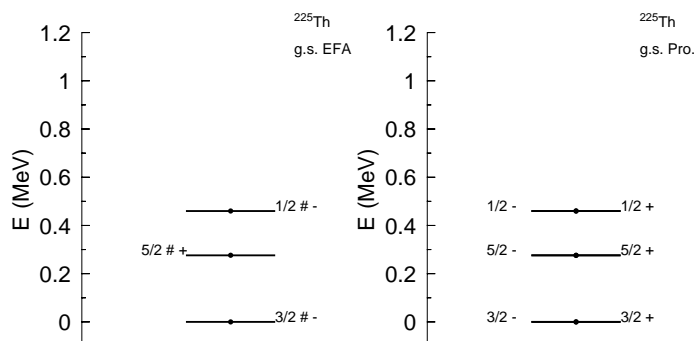


Figura 7.44: Se muestra el espectro teórico tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{225}Th . El estado fundamental experimental es $\frac{3}{2}^+$.

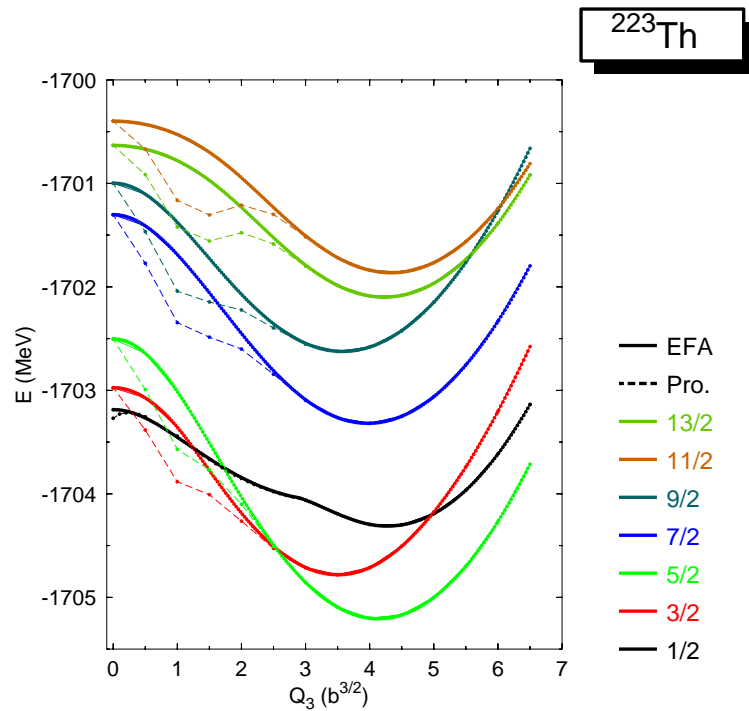


Figura 7.45: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Th . Los resultados de EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.46.

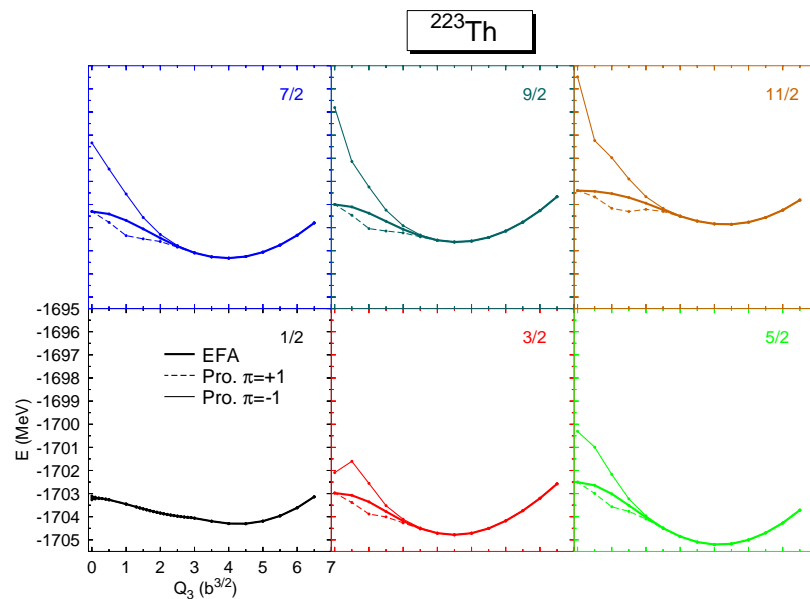


Figura 7.46: Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.45.

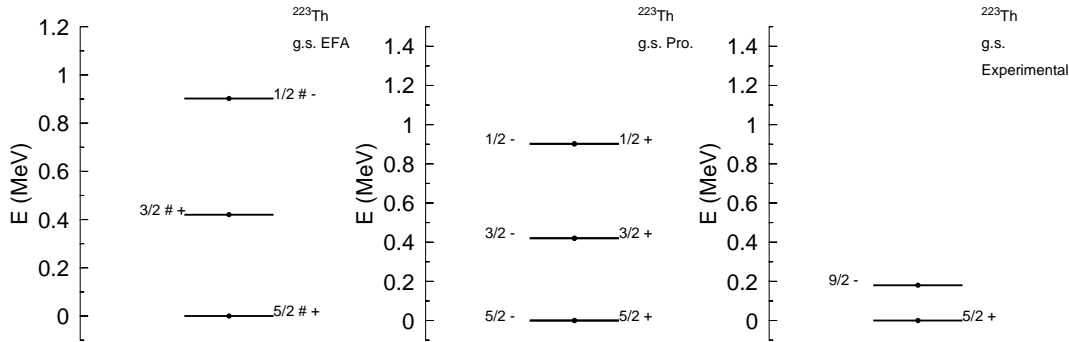


Figura 7.47: Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{223}Th .

Momentos dipolares

Como ya se dijo en el apartado 7.2.1, el momento dipolar eléctrico proporciona información sobre la probabilidad de transición E1 de los distintos estados. A continuación se muestran los resultados obtenidos de este observable en el estudio de los isótopos de Torio.

De las gráficas que muestran el momento dipolar, figura 7.48, se puede ver la misma tendencia que ya se vio en los núcleos de Radio, es decir una disminución progresiva del momento dipolar desde los isótopos más ligeros hasta los más pesados. En la gráfica superior izquierda, que corresponde al ^{221}Th , se ve cómo el momento dipolar aumenta al aumentar el momento octupolar; en la gráfica superior derecha, ^{227}Th , el aumento con el momento octupolar es menor y por último en la gráfica inferior, ^{231}Th , la tendencia de algunas configuraciones es de aumentar mientras que la de otras es de disminuir; pero todas ellas se sitúan en un entorno cercano del cero.

Se vuelve a desprender la idea de una transición de fase en la que el momento dipolar eléctrico van disminuyendo pasando de valores positivos a negativos gradualmente. En el cuadro 7.3 se pueden ver sus valores para los estados fundamentales y primeros excitados de cada isótopo.

Según los resultados experimentales [28] los momentos dipolares ^{221}Th 0.44 efm y ^{223}Th 0.40 efm. Los dos resultados de ^{221}Th y ^{223}Th son para espín mayor que $7\hbar$. Los resultados teóricos predichos para estos dos isótopos son 0.62 y 0.61. La diferencia es poca, y además se puede observar la misma tendencia decreciente, lo que hace pensar que a medida que los isótopos son más pesados la probabilidad de transición E1 se hace menor.

Como conclusión de este apartado se puede decir que la proyección a buena paridad de los números con deformación octupolar en el estado fundamental es importante cuando dicha deformación no supera valores de $\beta_3 = 0,07$. En el rango $\beta_3 = 0,01 - 0,06$ la proyección contribuye de forma notable a la reducción de la energía.

Por el contrario para deformaciones mayores, las funciones de onda no tienen tanto solape ($|\phi_0\rangle$ y su reversa espacial) y la contribución de la proyección es mínima o nula. Por tanto será útil proyectar núcleos cuyo estado fundamental posea deformación octupolar del orden $\beta_3 = 0,03$. Más allá de ese valor la proyección no aporta ninguna mejora.

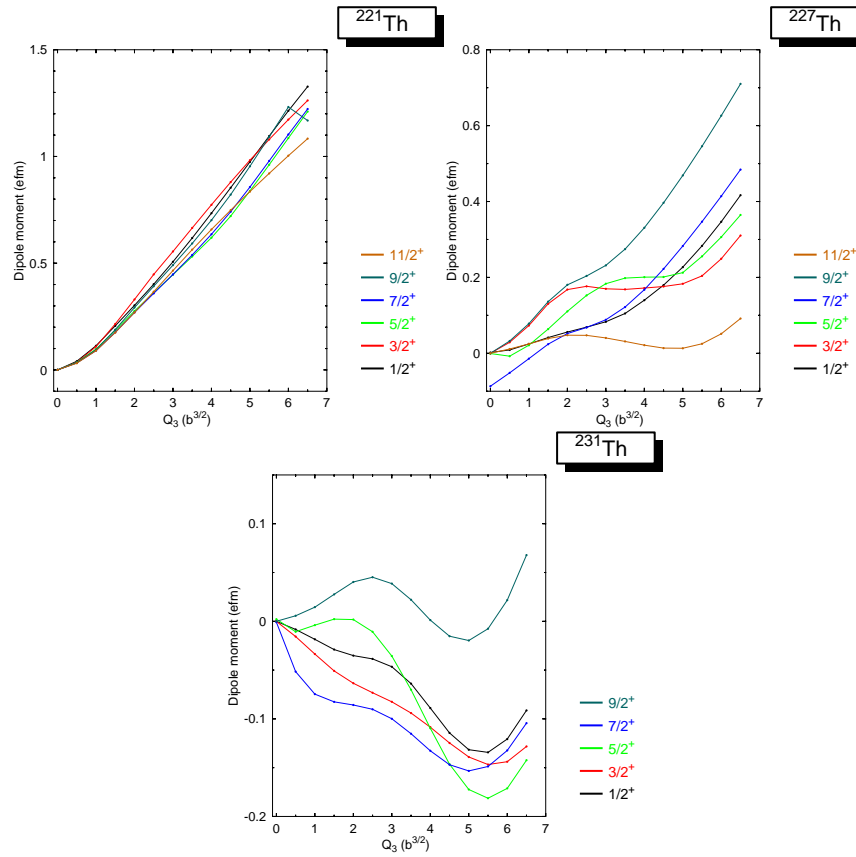


Figura 7.48: En esta figura se muestran los comportamientos del momento dipolar eléctrico en función del momento octupolar. Se han incluido los resultados para el ^{221}Th , ^{227}Th y ^{231}Th .

^{221}Th			^{223}Th			^{225}Th		
	j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar
g.s.	$\frac{1}{2}^+$	0.618	g.s.	$\frac{5}{2}^+$	0.614	g.s.	$\frac{3}{2}^+$	0.474
1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	0.215	1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	0.518	1 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^+$	0.378
2 ^o exc.	$\frac{5}{2}^+$	0.619	2 ^o exc.	$\frac{1}{2}^+$	0.531	2 ^o exc.	$\frac{1}{2}^+$	0.396
3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	0.176	3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	0.621	3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^+$	0.577

^{227}Th			^{229}Th			^{231}Th		
	j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar		j^π	mto.dipolar
g.s.	$\frac{1}{2}^+$	0.227	g.s.	$\frac{5}{2}^+$	0.038	g.s.	$\frac{1}{2}^+$	-0.029
1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	0.130	1 ^{er} exc.	$\frac{3}{2}^+$	0.010	1 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^+$	0.002
2 ^o exc.	$\frac{3}{2}^-$	0.183	2 ^o exc.	$\frac{3}{2}^-$	0.078	2 ^o exc.	$\frac{3}{2}^-$	-0.051
3 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^-$	0.198	3 ^{er} exc.	$\frac{7}{2}^-$	-0.025	3 ^{er} exc.	$\frac{5}{2}^-$	0.002

Cuadro 7.3: Resultados del momento dipolar para todos los isótopos de Torio estudiados. En la segunda fila de cada cuadro están los resultados de espín, paridad y momento dipolar para el estado fundamental; en las filas siguientes aparecen los resultados de los tres primeros estados excitados.

7.3. Procesos de Fisión en núcleos actínidos ligeros

Descripción microscópica de la fisión

El fenómeno de la fisión es uno de los aspectos más fascinantes de la dinámica del núcleo atómico. La fisión está gobernada por el balance entre las propiedades globales del núcleo (energías de superficie y repulsión coulombiana) y los efectos cuánticos de capas. La interacción entre ambas propiedades es la que determina el número de barreras que separan el estado fundamental nuclear del punto de escisión, así como la altura de la barrera. Es importante conocer las propiedades de las barreras ya que la fisión espontánea de un núcleo implica la penetración a través de dichas barreras.

Uno de los objetivos de esta tesis ha sido el de encontrar una aproximación teórica para la fisión de núcleos impares con un método completamente microscópico, es decir que esté basado únicamente en los grados de libertad nucleares y la interacción entre nucleones. No suele ser habitual encontrar este tipo de descripciones, ya que la mayoría de las que se emplean están basadas en modelos fenomenológicos que combinan el modelo de la gota líquida con las correcciones estimadas del modelo de capas con potenciales parametrizados deformados [50].

En la descripción enteramente microscópica que se ha tomado, los únicos parámetros de la teoría son aquellos que definen la forma de la interacción nucleón-nucleón efectiva. No hay ningún parámetro que dependa de la naturaleza del estado. Ésto resulta muy útil, ya que la fisión pasa por estados exóticos para los cuales no hay información experimental disponible.

Este tipo de aproximación microscópica no sólo da, como los modelos fenomenológicos, propiedades estáticas relevantes para la fisión (como las superficies de energía potencial) sino que también informa de los esquemas apropiados en los que desarrollar una descripción completamente cuántica de la dinámica dependiente del tiempo del fenómeno [16]. Para la fisión a baja energía, se sabe experimentalmente que la dinámica del proceso es esencialmente de naturaleza colectiva, aunque también la estructura interna juega un papel muy importante.

De los trabajos fenomenológicos se sabe que en el proceso de fisión hay que tener en cuenta esencialmente cuatro tipos de deformaciones, a saber, la elongación, la asimetría bajo reflexión, la asimetría axial (o γ) y, especialmente cerca del punto de escisión, el “necking”, es decir el número de partículas en la región de ruptura de masa. Así la fisión del núcleo se podrá inducir construyendo el valor de estas magnitudes. Estas deformaciones se pueden definir tomando los valores medios de los operadores multipolares correspondientes $q_2 = \langle \hat{Q}_{20} \rangle$, $q_3 = \langle \hat{Q}_{30} \rangle$, $q_{22} = \langle \hat{Q}_{22} + \hat{Q}_{2-2} \rangle$ y $q_4 = \langle \hat{Q}_{40} \rangle$ siendo q_i los parámetros colectivos que describen los distintos tipos de deformaciones experimentadas por el núcleo al fisionarse.

Las deformaciones multipolares se describen mediante dos posibles magnitudes, los momentos multipolares $Q_{\lambda 0}$ o los parámetros adimensionales β_λ . Las definiciones que se han utilizado para ambos son:



Figura 7.49: Densidad nuclear aproximada para grandes deformaciones.

$$Q_{\lambda 0} = r^\lambda P_\lambda(\cos\theta) = r^\lambda \sqrt{\frac{4\pi}{2\lambda + 1}} Y_{\lambda 0}(\theta, \phi) \quad (7.15)$$

$$\beta_2 = \sqrt{20\pi} \frac{Q_{20}}{3AR_0^2} \quad (7.16)$$

$$\beta_3 = \sqrt{28\pi} \frac{Q_{30}}{3AR_0^3} \quad (7.17)$$

$$\beta_4 = \sqrt{36\pi} \frac{Q_{40}}{3AR_0^4} \quad (7.18)$$

La evolución del sistema desde su estado fundamental hasta el punto de escisión implica un rango amplio de momentos cuadrupolares, así que una descripción correcta del fenómeno necesita un malla fina en esta cantidad, lo que hace a este cálculo extremadamente costoso computacionalmente. En este estudio se ha restringido el cálculo a casos en los que sólo se impone una ligadura en la deformación cuadrupolar axial. Además, es muy común que la configuración de fisión final sea asimétrica en masa y por tanto se tengan que considerar formas asimétricas respecto a la reflexión (deformación octupolar) como posibles soluciones. Ésto es posible en este estudio puesto que a la hora de definir la transformación de Bogoiubov, se ha permitido que existan mezclas entre estados de partículas con distinta paridad, lo que favorece configuraciones que rompen la paridad y exhiben una deformación octupolar. Debido a estas consideraciones la mayoría de los cálculos de fisión se han restringido a configuraciones con simetría axial, aunque con asimetría de reflexión.

A la hora de seleccionar los estados de cuasipartícula que se deben bloquear hay que tener en cuenta que el carácter autoconsistente de las ecuaciones HFB-EFA no garantiza que seleccionando el estado de cuasipartícula con energía más baja se vaya a encontrar la solución de mínimo. Esta propiedad, desde el punto de vista físico, tiene la desventaja de forzar al estudio de distintas posibilidades de bloqueo de esas configuraciones con las energías de cuasipartículas más bajas. Como consecuencia, se van a tener que considerar varios bloqueos, en concreto se han bloqueado los tres estados de cuasipartículas más bajos para cada valor de $j_z = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}, \frac{9}{2}$ y $\frac{11}{2}$. Ésto significa que se calculan 18 configuraciones para cada valor del momento cuadrupolar considerado. Se ha comprobado en puntos seleccionados que no se ha olvidado ninguna configuración relevante considerando estas tres configuraciones más bajas.

En estos cálculos se ha utilizado un base axial con $MZMAX = 16$ y con un parámetro de deformación $q = 1,5$ que permite tomar formas suficientemente deformadas

como las que aparecen en los procesos de fisión, lo que significa que mientras que en las componentes perpendiculares se han tomado 16 capas, en la dirección z se han utilizado 24 capas. Para más información acerca de la definición de estos parámetros de la base ver el apéndice de la Base Axial (Apéndice 1).

Por otro lado los parámetros de la base del oscilador b_z y b_{\perp} han sido optimizados en los núcleos pares mediante el método de Newton- Rampson para su mejor adaptación al estudio de cada barrera de fisión.

En el estudio del Radio y Torio de la sección precedente se vio que la proyección a buena paridad sólo mejoraba la descripción para rangos concretos de β_3 , ya que para valores mayores la simetría está tan rota que las funciones de onda inicial y la que se obtiene aplicando el operador paridad sobre ésta son ortogonales. Por tanto en toda la barrera de fisión, es mínima la repercusión de la proyección a buena paridad. En cuanto a la paridad de número, ya se vio en la sección 7.1 que su proyección mejora la energía de los estados en torno a 90 o 100 keV, lo cual no es una gran aportación. Por estos motivos en la descripción de las barreras de fisión sólo se ha empleado la aproximación de campo medio con la EFA.

Núcleos calculados Se han llevado a cabo cálculos de diversos núcleos en la región de los actínidos ligeros, como son el ^{235}U , ^{235}Np , ^{235}Pa , ^{237}Am y ^{237}Pu que se han elegido así para tener representantes donde se bloquea el canal de protones y otros donde se bloquean los neutrones. En concreto se bloquean los protones en $^{235}\text{Np}_{142}$, $^{235}\text{Pa}_{144}$, $^{237}\text{Am}_{142}$, y los neutrones en $^{235}\text{U}_{143}$ y $^{237}\text{Pu}_{133}$.

Para obtener el esquema de estados de cuasipartícula que se bloqueará, se han tomado dos alternativas, la primera consiste en partir del núcleo par vecino resuelto. La segunda alternativa es tomar las mismas ecuaciones de los núcleos pares y resolverlas imponiendo como número de partículas aquel del núcleo impar.

Selección del esquema de estados de cuasipartículas. Método 1: Núcleos pares vecinos

Dentro de la primera alternativa a su vez surgen dos posibilidades: elegir el núcleo par vecino $A + 1$ o el $A - 1$. Por ello se ha hecho un estudio de alcance de esta elección. Concretamente para el ^{235}U se pueden elegir el ^{234}U y el ^{236}U . Para comprobar si la selección del núcleo par es importante o no, se han realizado los cálculos de la superficie de energía potencial para el ^{235}U bloqueando el primer estado de cuasipartícula con $j_z = \frac{1}{2}$ tanto del núcleo par ^{234}U como del ^{236}U .

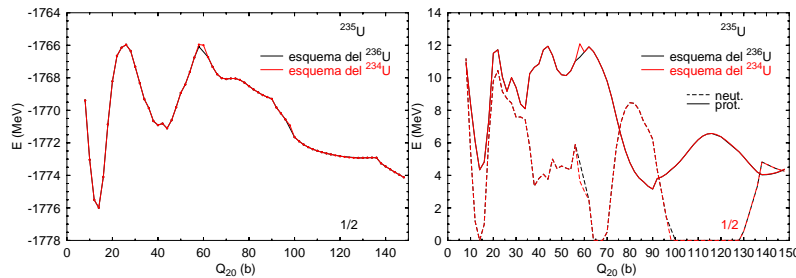


Figura 7.50: Energía total (izquierda) y de apareamiento (derecha) obtenidos partiendo de los niveles de cuasipartículas de los dos núcleos pares vecinos del ^{235}U (^{234}U y ^{236}U)

Analizando la energía total EFA y la energía de apareamiento de la figura. 7.50 se ve que los resultados son idénticos, así que se puede decir que la elección de un núcleo par u otro no afecta a los resultados del núcleo impar.

Selección del esquema de estados de cuasipartículas. Método 2: Cálculo promedio

Como segundo método de obtención del esquema de estados cuasipartículas, se toman las ecuaciones HFB para núcleos pares y se fija como ligadura en el número de partículas los valores de protones y neutrones del núcleo impar. Ésto simplemente resuelve las ecuaciones de núcleos pares, pero con valores tales de los parámetros de Lagrange que el promedio del número de partículas es el del núcleo impar. A este resultado se le llama “*cálculo promedio*”. Además de proporcionar los estados de cuasipartículas, este cálculo permite tener una referencia del método ordinario HFB con el que comparar los resultados obtenidos mediante el bloqueo de la *Equal Filling Approximation* (EFA).

En cuanto a estas dos formas de seleccionar los niveles de bloquear, para los núcleos ^{235}U , ^{235}Np y ^{235}Pa se ha elegido el método 1, eligiendo el núcleo ^{234}U como núcleo par de partida. Para el ^{237}Am y ^{237}Pu por el contrario se ha tomado el cálculo promedio como esquema de niveles de cuasipartículas. Para comparar ambos métodos se han representado las energías HFB del cálculo ^{235}U promedio y del ^{234}U . En el panel inferior de la figura 7.51 se observa que además de un desplazamiento global de las energías HFB del ^{235}U con respecto a las energías del ^{234}U , el comportamiento del momento cuadrupolar es esencialmente el mismo. Ésto se ve más claramente comparando la curva del ^{235}U con la curva discontinua que corresponde con los resultados del ^{234}U desplazados para hacer coincidir los mínimos de los estados fundamentales de los dos núcleos. En el panel superior de la figura 7.51 se han representado las energías de correlación “partícula-partícula” (con signo contrario) para protones y neutrones. Como se esperaba las energías de apareamiento de protones son esencialmente las mismas para los dos núcleos y la de los neutrones siguen la misma tendencia con la deformación octupolar, pero están desplazadas ligeramente.

7.3.1. Superficies de Energía Potencial y Espectros de los Estados Fundamental e Isomérico de Fisión

En todas las gráficas de las barreras de fisión que se van a mostrar, ya sean de la energía total, de la energía de apareamiento o de las masas colectivas, sólo se representan los resultados correspondientes al bloqueo de la configuración con la energía de cuasipartícula más baja. Además, se incluyen en todas las gráficas las curvas de energía del cálculo promedio con líneas azules discontinuas.

En la figura 7.52 se representan los resultados obtenidos para las energías del núcleo impar ^{235}U calculado con el esquema EFA-HFB para cada valor de j_z bloqueado. Se observa que para todos los valores de j_z , las curvas muestran dos mínimos alrededor de $Q_2 = 13$ b (estado fundamental) y $Q_2 = 42$ b (isómero de fisión) al igual que los resultados promedio. Esta es una característica común de todas las barreras de fisión que se han estudiado. Incluso los valores de las deformaciones en las que aparecen los mínimos son iguales en todos ellos. En la figura 7.54 se pueden ver estos mismos resultados para el núcleo ^{235}Np , en la figura 7.56 están los resultados del núcleo ^{235}Pa , la figura 7.58 muestra los resultados

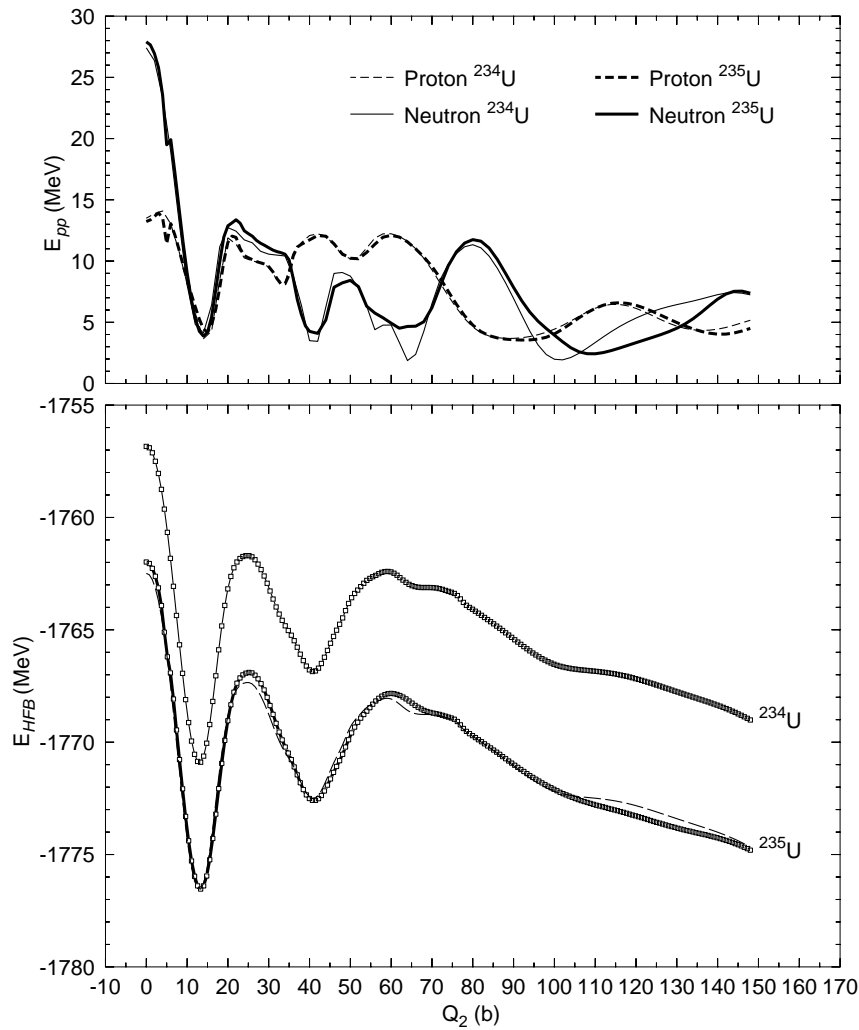


Figura 7.51: En la gráfica inferior están representadas las energías HFB como función del momento cuadrupolar Q_{20} . Se muestran los resultados de los cálculos promedio del ^{235}U (curva inferior) y los resultados del ^{234}U (curva superior). La línea discontinua corresponde a la energía ^{234}U desplazada hacia abajo para hacerla coincidir con la del ^{235}U . En la gráfica superior está representada la energía de apareamiento partícula-partícula como función del momento cuadrupolar.

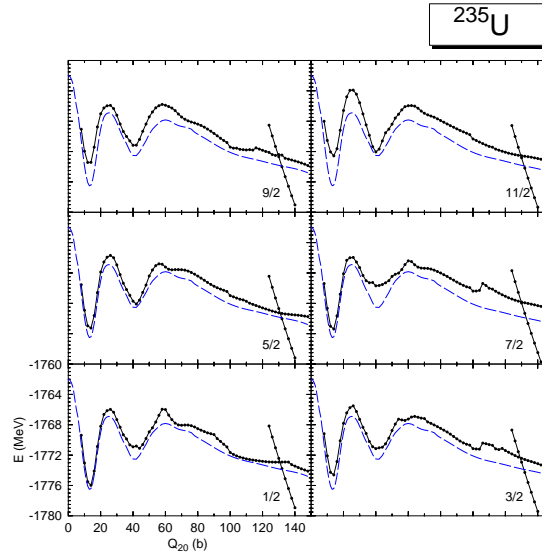


Figura 7.52: Energías EFA-HFB para el núcleo ^{235}U correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de neutrones más bajas con valores de j_z desde 1/2 hasta 11/2 (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua.

del ^{237}Am y finalmente en 7.60 están dibujados los resultados de ^{237}Pu .

En el cuadro 7.4 se pueden ver las características del estados fundamentales de todos estos núcleos obtenidos a nivel de campo medio EFA. Debido a la importancia que tiene la corrección rotacional, como energía de punto cero asociada con la restauración de la simetría rotacional, también se muestran los resultados derivados tras considerar dicha corrección.

Núcleo	j_z^π	$Q_{20}^{g.s.} (b) / \beta_2^{g.s.}$	$E_{g.s.}^{EFA} (MeV)$	$E_{g.s.}^{EFA-RC} (MeV)$
^{234}U	0^+	14 / 0.277	-1770.65	-1773.66
^{235}Pa	$\frac{3}{2}^+$	14 / 0.275	-1774.41	-1777.16
^{235}U	$\frac{1}{2}^+$	14 / 0.275	-1775.99	-1778.73
^{235}Np	$\frac{5}{2}^?$	14 / 0.275	-1775.73	-1778.62
^{236}U	0^+	14 / 0.273	-1781.92	-1784.89
^{237}Am	$\frac{5}{2}$	14 / 0.272	-1785.58	-1788.43
^{237}Pu	$\frac{1}{2}$	14 / 0.272	-1787.45	-1790.15

Cuadro 7.4: Características del estado fundamental de los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la configuración de mínima energía, a continuación está la deformación cuadrupolar, las energías EFA y en la última columna se registran las energías EFA con la corrección rotacional.

Los resultados EFA de todos los núcleos muestran un comportamiento similar al que presenta el cálculo promedio en cuanto a mínimos y máximos; aunque también hay ciertas diferencias, como el desplazamiento de las curvas de energía potencial hacia arriba respecto a las energías promedio, sobre todo para deformaciones grandes. Esta separación de

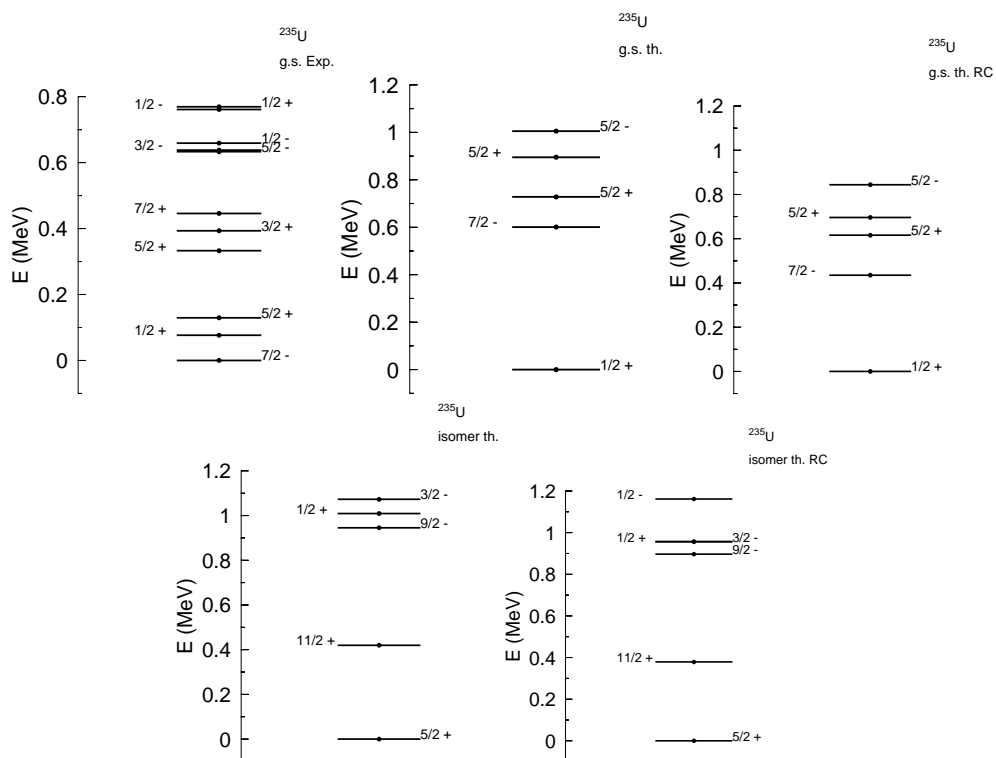


Figura 7.53: De las gráficas superiores la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica en el marco de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}U y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene al tener en cuenta la corrección rotacional. Todos los niveles de esta gráfica tienen básicamente la misma deformación cuadrupolar $Q_2 \approx 14$ b. En la parte inferior están las gráficas del espectro teórico correspondiente al isómero de fisión con y sin corrección rotacional.

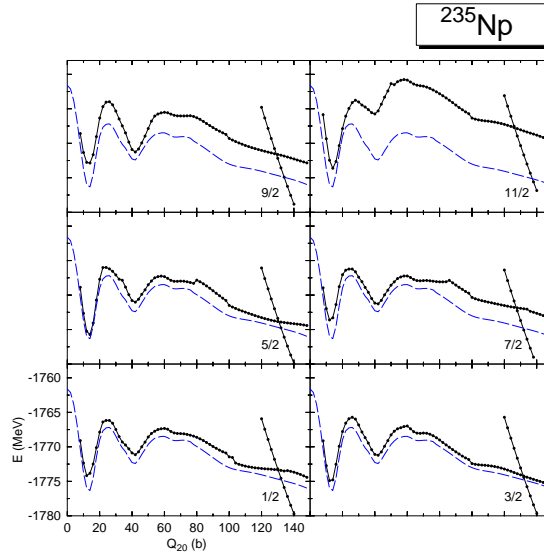


Figura 7.54: Energías EFA-HFB para el núcleo ^{235}Np correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de protones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua.

las superficies de energía potencial (PES) EFA corresponde a la llamada energía de especialización [50] que fue introducida para explicar los factores “*hindrance*” en las semividas de fisión de los núcleos impares [54] en comparación con los valores de los núcleos pares vecinos.

El factor hindrance está definido como la relación entre el valor experimental de la semivida de fisión espontánea respecto al valor teórico.

$$HF = \frac{t_{\frac{1}{2}}^{exp.}}{t_{\frac{1}{2}}^{th.}} \quad (7.19)$$

Para el núcleo ^{235}U se obtiene el estado fundamental con espín $j_z = 1/2^+$ y el isómero de fisión con $j_z = 5/2$. En la figura 7.53 se muestran todas las predicciones teóricas de los niveles más bajos del estado fundamental y del espectro del isómero de fisión. De estos espectros se puede observar que no se reproduce el espín y paridad del estado fundamental, ya que se obtiene un $1/2^+$ mientras que experimentalmente se encuentra un $7/2^-$; sin embargo, el primer estado excitado observado experimentalmente es un $1/2^+$ y el primer estado excitado predicho por EFA es un estado $7/2^-$. Una mirada más global a ambos espectros revela que el mismo tipo de niveles aparecen en los dos gráficos, experimentales y teóricos, pero ordenados de forma distinta. De hecho si artificialmente se desplaza el nivel $1/2^+$ hasta la posición entre los niveles $7/2^-$ y $5/2^+$ se obtiene un mejor acuerdo con el experimento. También se puede observar el efecto que tiene la corrección rotacional reduciendo la diferencia de energía entre todos los niveles. Es difícil atribuir esta discrepancia a un hecho único concreto; podría ser debido a la interacción o a otros efectos de correlación no considerados a nivel de campo medio.

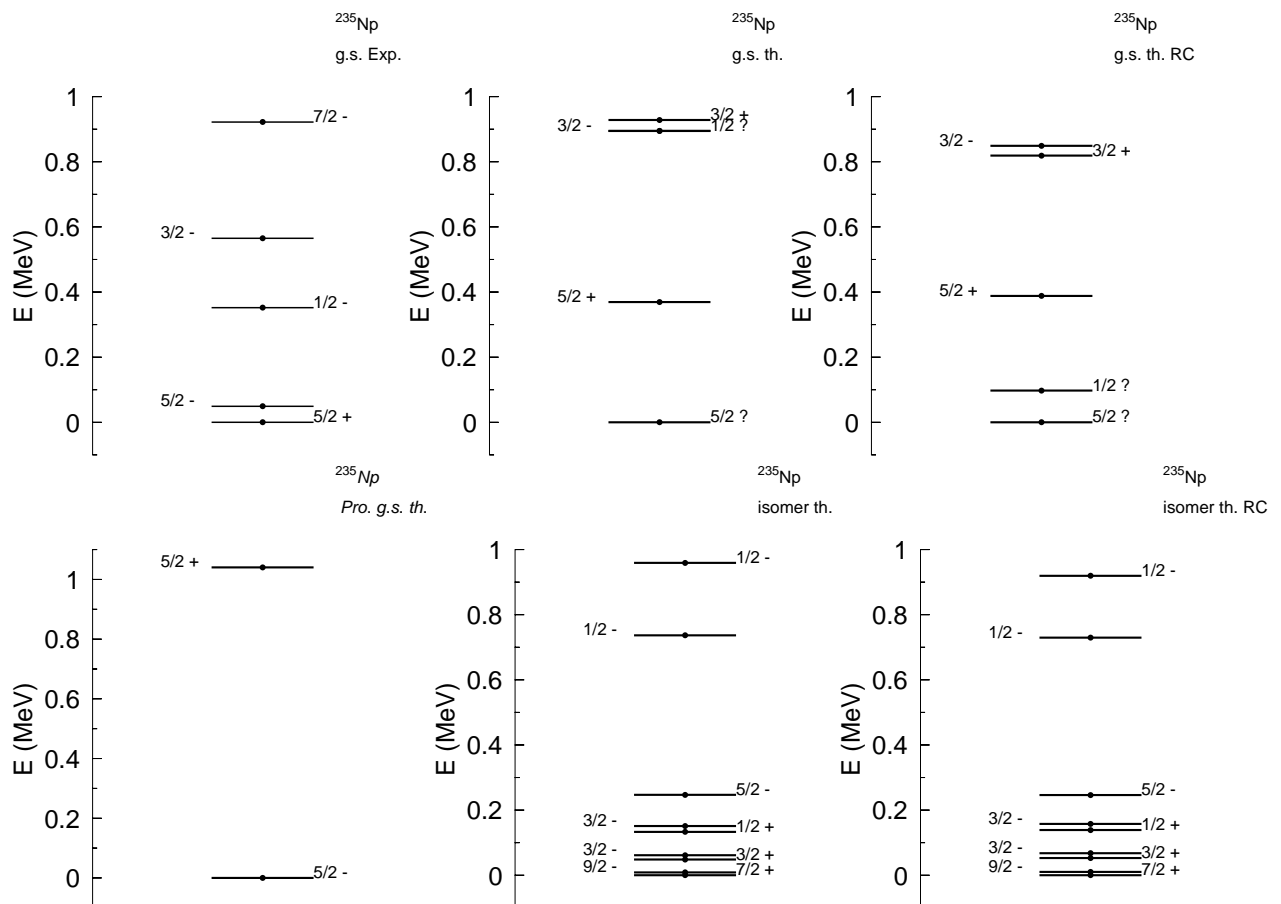


Figura 7.55: De las gráficas superiores la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}Np y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene tras tener en cuenta la corrección rotacional. En la parte inferior está el espectro resultante al proyectar los estados a buena paridad y los espectros teóricos correspondientes al isómero de fisión con y sin corrección rotacional.

En lo que respecta al isómero de fisión, la predicción da un estado $5/2^+$ con el primer estado excitado $11/2^+$. Esta predicción todavía tendrá que ser confirmada experimentalmente.

Para el núcleo ^{235}Np los resultados son parecidos. En la figura 7.55 se muestran las predicciones teóricas de los niveles más bajos del estado fundamental y del isómero de fisión. Teóricamente se obtiene $j_z = 5/2^-$ (sabido despues de proyectar a buena paridad) como estado fundamental y $j_z = 5/2^+$ como primer estado excitado. Experimentalmente se obtiene lo inverso, es decir $j_z = 5/2^+$ el fundamental y $j_z = 5/2^-$ el estado excitado. En este núcleo la corrección rotacional tiene como efecto el desplazamiento del estado $j_z = 1/2$, que aparecía como segundo estado excitado a una energía de apenas 100keV por encima del estado fundamental. Como curiosidad hay que mencionar lo que ocurre en el espectro del mínimo superdeformado, donde la densidad de estados aumenta y se pueden encontrar 4 niveles en menos de 80 keV. El nivel más bajo corresponde a $j_z = 7/2^+$ y casi degenerado aparece $j_z = 9/2^-$. Experimentalmente no se han identificado todavía estos estados.

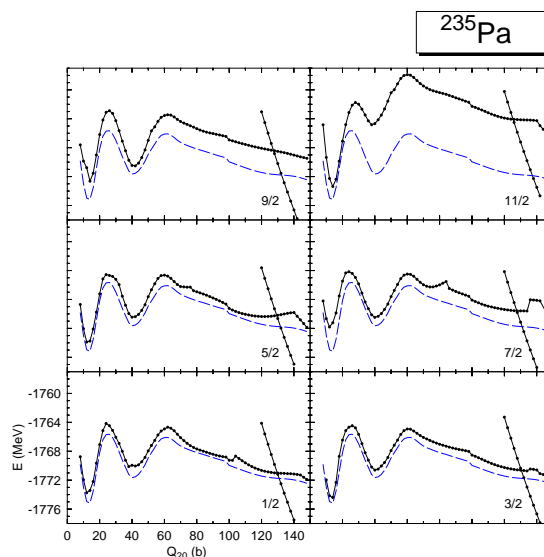


Figura 7.56: Energías EFA-HFB para el núcleo ^{235}Pa correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de protones ás bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua.

Para el núcleo ^{235}Pa el estado fundamental predicho por EFA es $j_z = 3/2^+$ y para el isómero de fisión $j_z = 9/2^-$. En la figura 7.57 se muestran todas las predicciones teóricas de ambos espectros. La mayor carencia que se observa en el espectro teórico es la del estado $j_z = 3/2^-$, que es el estado fundamental experimental. En la predicción teórica dicho estado no aparece hasta casi 1.8 MeV por encima del fundamental. El resto de niveles experimentales se obtienen con mayor grado de acuerdo, como el primer estado excitado teórico $j_z = 1/2^+$ y sobre todo el segundo estado excitado $j_z = 3/2^+$. El efecto de la corrección rotacional es el descenso generalizado de todos los estados sin alterar su orden.

La aproximación EFA aplicada al núcleo ^{237}Am generan un estado fundamental $j_z = 5/2^{+/-}$ (que se conoce tras realizar una proyección para restaurar la paridad) y un estado $j_z = 1/2^+$ para el mínimo superdeformado, tal cual se puede observar en la figura

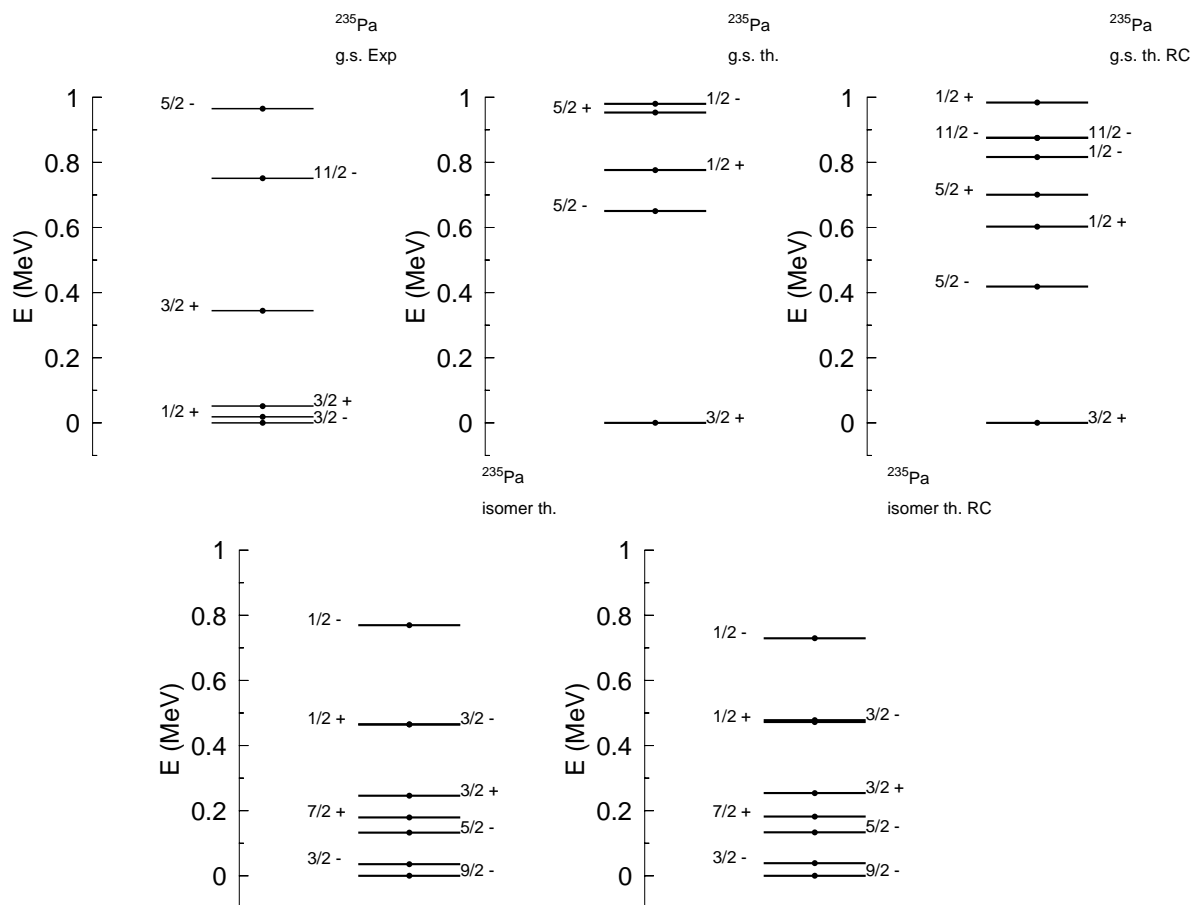


Figura 7.57: De las gráficas superiores, la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}Pa y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene al tener en cuenta la corrección rotacional. En la parte inferior están los espectros teóricos del isómero de fisión con y sin corrección rotacional.

7.59. Como se verá a continuación el estado de mínima energía es una configuración que rompe la simetría de reflexión espacial adquiriendo deformación octupolar, por lo que la paridad deja de ser una simetría y sólo se puede saber su espín. Experimentalmente se sabe únicamente que el estado fundamental es $j_z = 5/2^-$, lo cual coincide con el valor j_z predicho. En el espectro del isómero de fisión se obtienen tres estados casi degenerados $1/2^+$, $7/2^+$ y $3/2^+$.

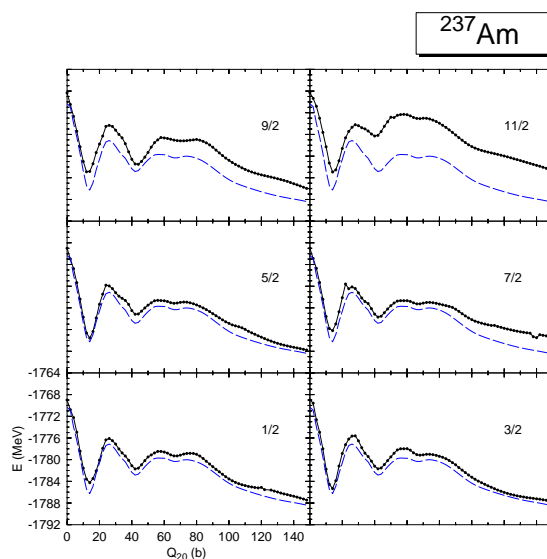


Figura 7.58: Energías EFA-HFB para el núcleo ^{237}Am correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de protones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado para el cálculo promedio con línea discontinua.

Por último para el núcleo ^{237}Pu , según se muestra en la figura 7.61, se obtiene un buen acuerdo entre el espectro experimental y teórico del estado fundamental. El estado teórico predicho es $j_z = 1/2$ y los dos siguientes excitados son $5/2$ y $7/2$. No se puede saber la paridad de estos niveles porque en esas configuraciones existe deformación octupolar que rompe la inversión de la simetría de reflexión espacial, al igual que ocurría para ^{237}Am . La buena noticia es que los tres estados experimentales más bajos en energía son el $j_z = 7/2^-$, $1/2^+$ y $5/2^+$. Así que aunque desordenados, los estados predichos aparecen en el espectro experimental. En el isómero de fisión se obtiene un estado $j_z = 5/2^+$, del cual se conoce la paridad puesto que su momento octupolar es cero. El efecto de la corrección rotacional es el mismo que en los casos anteriores, es decir, desplaza hacia abajo todos los estados excitados.

Se ha extraído también el valor de las alturas de las barreras como la diferencia de energía HFB-EFA entre el estado fundamental y el estado situado en el punto de máximo de la curva. En el cuadro 7.5 se registran los valores de los momentos y deformaciones cuadrupolares de los puntos de máximo de las barreras, así como sus energías HFB-EFA con y sin la corrección rotacional.

En todos los núcleos este punto aparece siempre con la misma deformación. El cuadro 7.6 muestra los valores concretos de cada barrera. Todos los valores están situados en torno a 9.5 - 10 MeV si no se considera la corrección rotacional; pero en caso de tomar

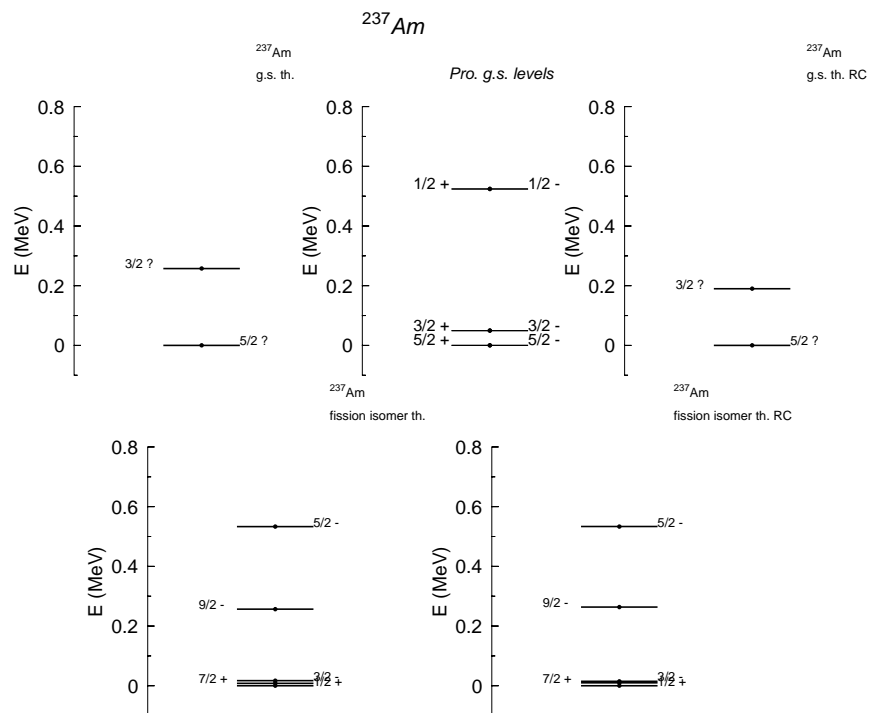


Figura 7.59: De las gráficas superiores la de la izquierda muestra la predicción teórica de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{237}Am . Puesto que algunos de esos estados tienen la paridad rota, se han proyectado dichos estados a buena paridad y se ha encontrado el espectro que aparece en el centro. A la derecha se muestra el espectro que tiene en cuenta la corrección rotacional. Todos los niveles de esta gráfica tienen básicamente la misma deformación cuadrupolar $Q_2 \approx 14$ b. En la parte inferior están los espectros teóricos del isómero de fisión con y sin corrección rotacional. Experimentalmente se obtiene un estado fundamental $\frac{5}{2}^-$.

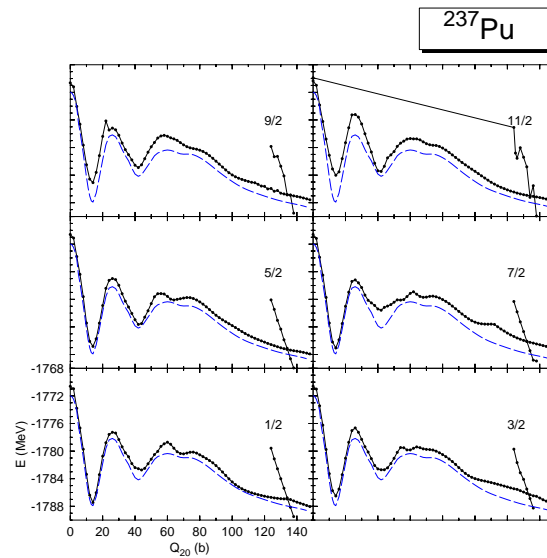


Figura 7.60: Energías EFA-HFB para el núcleo ^{237}Pu correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de neutrones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua.

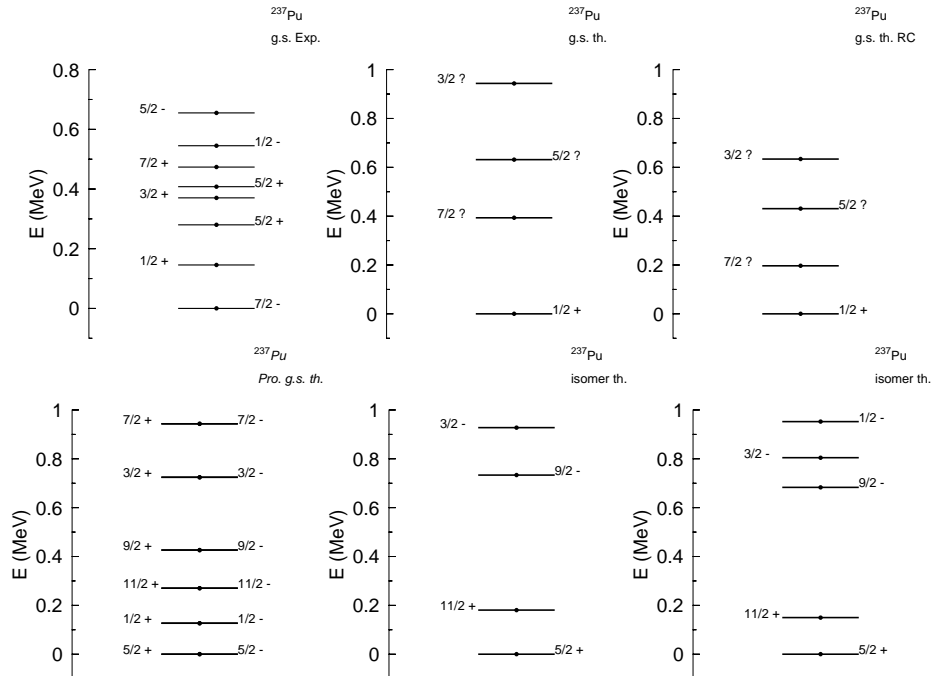


Figura 7.61: De las gráficas superiores la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{237}Pu y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene al tener en cuenta la corrección rotacional. En la parte inferior izquierda está el espectro del estado fundamental obtenido tras restaurar la paridad de los estados y a su derecha se encuentran los espectros teóricos del isómero de fisión con y sin corrección rotacional.

Núcleo	j_z^π	$Q_{20}^{saddle}(b) / \beta_2^{saddle}$	$E_{saddle}^{EFA} (MeV)$	$E_{saddle}^{EFA-RC} (MeV)$
^{234}U	0^+	24 / 0.450	-1761.72	-1765.31
^{235}Pa	$\frac{5}{2}^?$	26 / 0.479	-1764.68	-1768.28
^{235}U	$\frac{1}{2}^?$	26 / 0.480	-1765.97	-1769.67
^{235}Np	$\frac{7}{2}^?$	26 / 0.480	-1766.23	-1769.94
^{236}U	0^+	26 / 0.476	-1771.98	-1775.66
^{237}Am	$\frac{7}{2}^?$	26 / 0.473	-1776.14	-1779.798
^{237}Pu	$\frac{1}{2}^?$	26 / 0.473	-1777.28	-1780.98

Cuadro 7.5: Características del punto de ensilladura de la barrera de fisión de los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la configuración de mínima energía, en la tercera la deformación cuadrupolar, en la siguiente las energías EFA y en la última las energías EFA con la corrección rotacional.

en consideración dicha corrección, se observa una disminución de casi 1 MeV en todos los núcleos. Éste es un hecho importante, ya que para evaluar las semividas de fisión espontánea, la barrera obtenida modificará la probabilidad de penetración a través de ella y en consecuencia el valor de la semivida. Éstos cálculos se presentan en la sección 7.3.5.

Las diferencias que se observan entre los valores teóricos de las barreras de fisión con la corrección rotacional y sus correspondientes datos experimentales pueden estar debidas en gran parte a que no se ha tenido en cuenta la triaxialidad. Éste grado de libertad puede reducir, en algunos casos, la barrera de fisión hasta en 4 MeV [7] [3].

Núcleo	$\Delta E_{saddle-g.s.}^{EFA} (MeV)$	$\Delta E_{saddle-g.s.}^{EFA-RC} (MeV)$	$\Delta E_{saddle-g.s.}^{Exp} (MeV)$ [55]
^{234}U	8.93	8.35	4.80
^{235}Pa	9.73	8.88	
$^{235}\text{Pa}_{AVE}$	9.51	8.93	-
^{235}U	10.02	9.06	5.25
$^{235}\text{U}_{AVE}$	9.61	8.84	-
^{235}Np	9.5	8.68	
$^{235}\text{Np}_{AVE}$	9.13	8.44	-
^{236}U	9.94	9.23	5.00
^{237}Am	9.44	8.63	
$^{237}\text{Am}_{AVE}$	9.14	8.41	-
^{237}Pu	10.17	9.17	5.10
$^{237}\text{Pu}_{AVE}$	9.75	9.00	-

Cuadro 7.6: Características del punto de ensilladura en la barrera de fisión de los núcleos estudiados. El subíndice AVE denota los resultados de los cálculos promedio. En la segunda columna se muestran las energías EFA, en la tercera las energías EFA con la corrección rotacional y en la última las alturas de las barreras.

Resulta interesante verificar el efecto par-impar en estos resultados de las barreras de fisión. Para ello se han calculado las alturas de las barreras de los cálculos promedio, ya que, como ya se comentó, estos cálculos promedio mantienen la estructura de un núcleo

par. Por ello se considera válido utilizar estos resultados promedio como buenos modelos de los cálculos pares. Se puede ver en todos ellos el efecto par-impar. En todos ellos los resultados con la EFA son mayores que los resultados promedio.

Para momento cuadrupolar $Q_{20} = 42 \text{ fm}^2$ se encuentran, en la mayor parte de los núcleos estudiados, un mínimo superdeformado o isómero de fisión. En el cuadro 7.7 están las características de estos mínimos y en el cuadro 7.8 están registradas sus energías de excitación con respecto al estado fundamental.

En casos como el ^{237}Pu y ^{237}Am , además de este primer isómero común al resto de núcleos, se encuentra otro pequeño mínimo en $Q_{20} = 70 \text{ fm}^2$. En algunas configuraciones se distingue más que en otras. Tal vez esto no dé lugar a un estado ligado ya que parece poco profundo.

Núcleo	j_z^π	$Q_{20}^{isom}(b) / \beta_2^{isom}$	$E_{isom}^{EFA} (MeV)$	$E_{isom}^{EFA-RC} (MeV)$
^{234}U	-	40 / 0.681	-1766.79	-1770.61
^{235}Pa	$\frac{9}{2}^-$	40 / 0.677	-1770.60	-1774.43
^{235}U	$\frac{5}{2}^+$	42 / 0.70	-1772.10	-1775.92
^{235}Np	$\frac{7}{2}^+$	42 / 0.70	-1771.28	-1775.16
^{236}U	-	42 / 0.697	-1778.03	-1781.99
^{237}Am	$\frac{1}{2}^+$	42 / 0.695	-1781.70	-1785.57
^{237}Pu	$\frac{5}{2}^+$	42 / 0.695	-1783.63	-1787.44

Cuadro 7.7: Características del isómero de fisión en los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la configuración de mínima energía, en la tercera la deformación cuadrupolar, en la cuarta se registran las energías EFA y en la última las energías EFA con la corrección rotacional.

Núcleo	$\Delta E_{isom-g.s.}^{EFA} (MeV)$	$\Delta E_{isom-g.s.}^{EFA-RC} (MeV)$	$\Delta E_{isom-g.s.}^{exp} (MeV)$ [55]
^{234}U	3.86	3.05	
^{235}Pa	3.81	2.73	
^{235}U	3.89	2.81	
^{235}Np	4.45	3.46	
^{236}U	3.89	2.90	2.75
^{237}Am	3.88	2.86	2.40
^{237}Pu	3.82	2.71	2.60

Cuadro 7.8: Energías de excitación de los isómeros de fisión. En la segunda columna se muestra las energías de excitación EFA, en la tercera las mismas energías con la corrección rotacional y en la cuarta los datos experimentales.

De nuevo el efecto de la corrección rotacional, como se ve en el cuadro 7.8 es reducir las energías, en este caso, la energía de excitación del isómero, lo que llega a tener un gran acuerdo con los resultado experimentales.

7.3.2. Correlaciones octupolares en las barreras de fisión

Es importante considerar el grado de libertad octupolar para la descripción del fenómeno de fisión, puesto que permitiendo esta deformación las soluciones HFB-EFA son más ligadas. Como se puede ver en la figura 7.62 es generalizado el comportamiento de la deformación octupolar, que siempre aparece en $Q_{20} = 50b$. Para los otros núcleos ocurre de la misma forma; se puede ver que para esta misma deformación cuadrupolar Q_{20} , aparecen las correlaciones octupolares con el mismo comportamiento creciente. Sólo hay dos casos dignos de mencionar, el ^{237}Am y ^{237}Pu , que ya antes de $Q_{20} = 50b$ toman valores no despreciables de la deformación octupolar. Para esos casos la solución con reflexión espacial tiene una energía mayor que la del caso deformado.

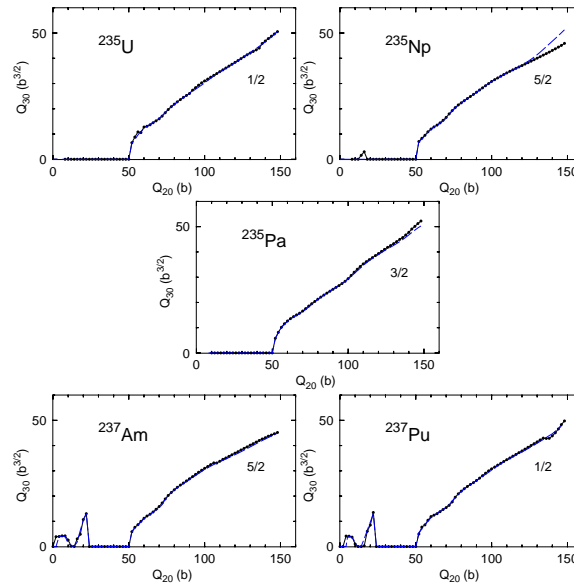


Figura 7.62: Se muestran los comportamientos de las deformaciones octupolares de las barreras de fisión en función del momento cuadrupolar. Se observa un patrón idéntico en todos los núcleos.

7.3.3. Punto de escisión nuclear

Para evaluar de un modo aproximado en qué punto del proceso se produce la fisión, se han llevado a cabo cálculos con configuraciones análogas a las realizadas, pero con 2 fragmentos, para solaparlas a las curvas de energía del núcleo compuesto y deducir el punto de corte. Ésto es lo que muestran las líneas casi verticales que se muestran a la derecha de todas las figuras 7.52, 7.54, 7.56, 7.58 y 7.60 en sus distintos valores de momento angular bloqueado. El efecto de capas promueve que uno de los núcleos hijo tenga número de partículas mágico, por su estabilidad y por tanto que el otro este deformado; ésto es lo que se ha querido mostrar en la figura 7.63. Por ejemplo los productos de fisión que se han encontrado para la fisión del $^{235}\text{U}_{143}$ son $^{133}\text{Sb}_{82}$ y $^{102}\text{Nb}_{61}$ donde uno es practicamente esférico y el otro tiene deformación cuadrupolar. Para el $^{235}\text{Np}_{142}$ los núcleos hijos son $^{134}\text{Te}_{82}$ y $^{101}\text{Nb}_{60}$. En la fisión del $^{235}\text{Pa}_{144}$ se encuentran $^{132}\text{Sn}_{82}$ y $^{103}\text{Nb}_{62}$. El $^{237}\text{Am}_{142}$ se fisiona produciendo $^{135}\text{I}_{82}$ y $^{102}\text{Nb}_{60}$ y por último el $^{237}\text{Pu}_{143}$ tiene como núcleos hijo a $^{134}\text{Te}_{82}$ y $^{103}\text{Mo}_{61}$. Éstas son las que se han obtenido en el estudio aquí realizado, pero

hay que recalcar que cada una de estas parejas de núcleos hijos son una posibilidad de las muchas que pueden aparecer al producirse la fisión del núcleo padre correspondiente.

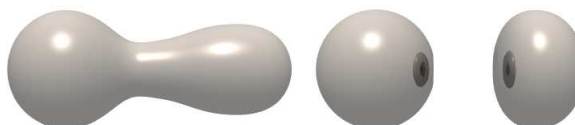


Figura 7.63: Representación aproximada de la densidad nuclear junto antes y después de la escisión

Las características del punto de escisión, su deformación y su energía, están registradas en el cuadro 7.9. Se ha querido mostrar la energía del punto de corte de la configuración del núcleo compuesto y de los dos núcleos hijos indicando su energía en los punto anterior y posterior de la escisión.

Como ya se ha visto anteriormente la importancia de la corrección rotacional, también en el cálculo de este punto de ruptura se ha tenido en cuenta. Los resultados correspondientes aparecen en el cuadro 7.10. Se puede ver que el momento cuadrupolar es el mismo en la mayoría de los núcleos, no así la energía que varía de manera sustancial.

Núcleo	$Q_{20}^{escision}(b) / \beta_2^{escision}$	j_z	$E_{escision}^{EFA-1frag} (MeV)$	$E_{escision}^{EFA-2frag} (MeV)$
^{235}Pa	128-130	$\frac{1}{2}$	$E_{128} = -1770,99$ $E_{130} = -1771,02$	$E_{128} = -1769,83$ $E_{130} = -1771,18$
^{235}U	130-132	$\frac{5}{2}$	$E_{130} = -1773,24$ $E_{132} = -1773,33$	$E_{130} = -1772,68$ $E_{132} = -1774,04$
^{235}Np	130-132	$\frac{3}{2}$	$E_{130} = -1774,08$ $E_{132} = -1774,25$	$E_{130} = -1773,06$ $E_{132} = -1774,44$
^{237}Am	134-136	$\frac{3}{2}$	$E_{134} = -1786,99$ $E_{136} = -1787,06$	$E_{134} = -1786,55$ $E_{136} = -1787,95$
^{237}Pu	134-136	$\frac{5}{2}$	$E_{134} = -1787,27$ $E_{136} = -1787,37$	$E_{134} = -1787,11$ $E_{136} = -1788,62$

Cuadro 7.9: Características del punto de escisión de la fisión de los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la deformación cuadrupolar, en la tercera columna están el espín de la configuración de energía mínima. A continuación se registran las energías EFA en el punto de escisión para la configuración de un fragmento y en la última columna están las energías EFA para la solución con dos fragmentos.

7.3.4. Energía de apareamiento y Masas Colectivas

Otra pieza importante que suministra información en el proceso de fisión corresponde a las energías de apareamiento de protones y neutrones según la configuración de bloqueos correspondiente. Su carácter es no homogéneo en la mayor parte de las deformaciones a

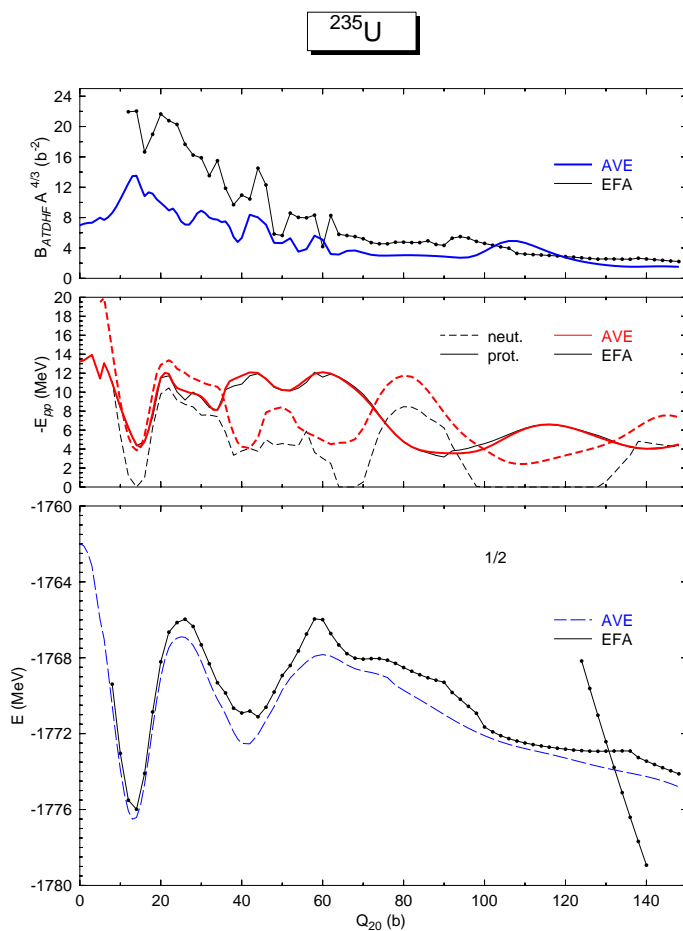


Figura 7.64: Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 1/2$ para el núcleo ^{235}U . En la parte inferior aparece las energía promedio (AVE) y EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules).

Núcleo	$Q_{20}^{escision}(b) / \beta_2^{escision}$	j_z	$E_{escision}^{EFA-RC-1frag} (MeV)$	$E_{escision}^{EFA-RC-2frag} (MeV)$
^{235}Pa	130-132	$\frac{1}{2}$	$E_{130} = -1775,88$ $E_{132} = -1775,91$	$E_{130} = -1775,80$ $E_{132} = -1777,12$
^{235}U	130-132	$\frac{5}{2}$	$E_{130} = -1778,08$ $E_{132} = -1778,17$	$E_{130} = -1777,29$ $E_{132} = -1778,64$
^{235}Np	132-134	$\frac{3}{2}$	$E_{132} = -1779,14$ $E_{134} = -1779,31$	$E_{132} = -1779,07$ $E_{134} = -1780,42$
^{237}Am	134-136	$\frac{3}{2}$	$E_{134} = -1791,87$ $E_{136} = -1791,95$	$E_{134} = -1791,19$ $E_{136} = -1792,59$
^{237}Pu	134-136	$\frac{5}{2}$	$E_{134} = -1792,12$ $E_{136} = -1792,23$	$E_{134} = -1791,72$ $E_{136} = -1793,23$

Cuadro 7.10: Características del punto de escisión de la fisión de los núcleos estudiados incluyendo la corrección rotacional. En la segunda columna se muestra la deformación cuadrupolar, en la tercera columna está el espín de la configuración de energía mínima. A continuación se registran las energías EFA en el punto de escisión para la configuración de un fragmento y en la última columna están las energías EFA para la solución con dos fragmentos.

excepción de los puntos de mínima energía donde las correcciones de apareamiento tienden a ser menores.

Teniendo como referencia las energías de apareamiento de los núcleos pares, se espera un cambio en el canal de isospín bloqueado, mientras que en el otro canal no bloqueado se esperan resultados muy similares. En panel central de la figura 7.64 muestra las energías de apareamiento para el ^{235}U , donde están representados los resultados bloqueados y los resultados promedios. Se ha tomado únicamente la configuración de mínima energía en el estado fundamental. El resto de configuraciones de estados bloqueados tiene una forma muy parecida. Debido al efecto del bloqueo en los neutrones se observan correlaciones de apareamiento substancialmente más pequeños que las correspondientes al cálculo promedio. También se puede ver el mismo efecto en el ^{237}Pu , figura 7.68 panel central, que también bloquea en neutrones. En el resto de casos se encuentra la misma reducción de apareamiento pero en las energías de protones, mientras que las energías de apareamiento de los neutrones quedan prácticamente iguales. En la gráfica central de la figura 7.65 están los resultados del ^{235}Np , en la figura 7.66 los del ^{235}Pa y en la figura 7.67 se muestran los resultados del ^{237}Am .

Como consecuencia de este descenso de las correlaciones de apareamiento, la masa colectiva cuadrupolar aumenta si se compara con el resultado promedio (típicamente es un factor 1.2-1.4 mayor) y en algunas regiones puede ser en más de un factor 2. Ésto, de nuevo, es lo que se espera puesto que la masa colectiva, como se vio en el capítulo 5 depende de la inversa de las energías de excitación de dos cuasipartículas y esta cantidad se vuelve más pequeña para los sistemas en los que las correlaciones de apareamiento son menores. La parte superior de las figuras 7.64, 7.65, 7.66, 7.67 y 7.68 muestra las masas colectivas de los núcleos ^{235}U , ^{235}Np , ^{235}Pa , ^{237}Am y ^{237}Pu , respectivamente de las configuraciones de mínima energía en el estado fundamental.

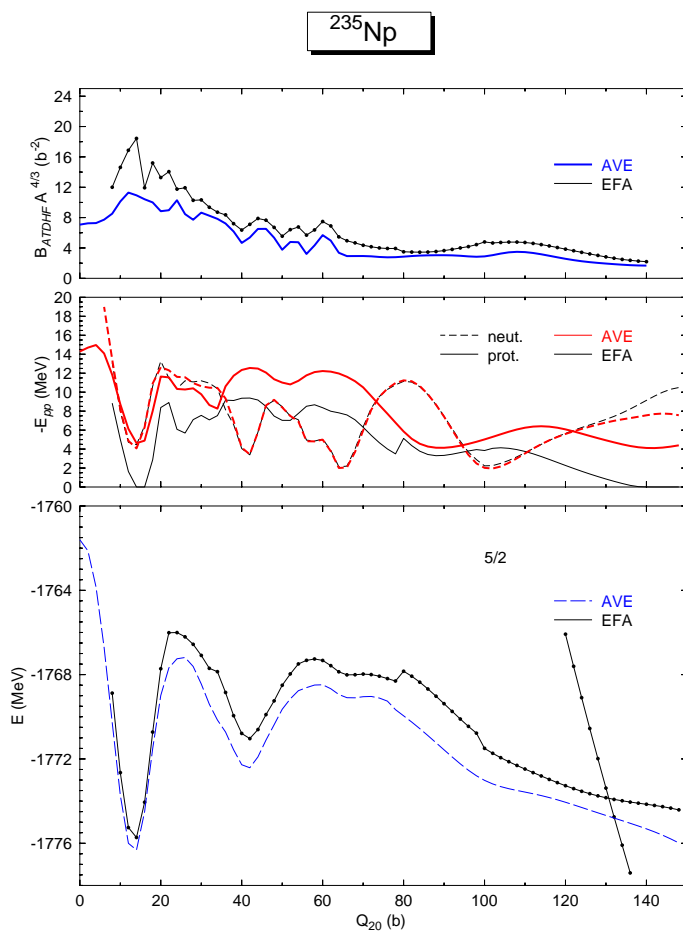


Figura 7.65: Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 5/2$ para el núcleo ^{235}Np . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules).

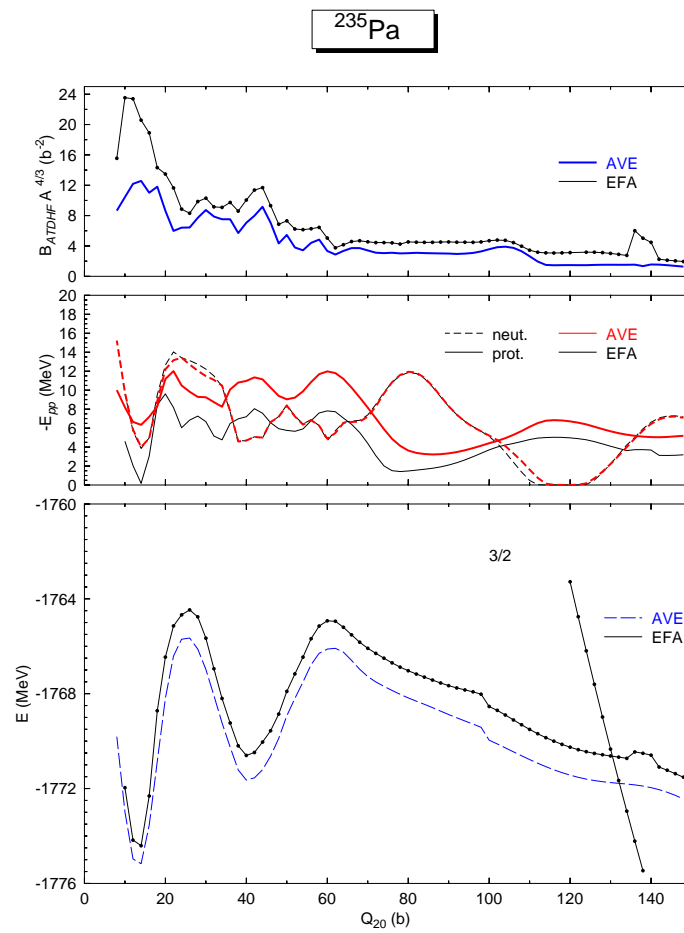


Figura 7.66: Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 3/2$ para el núcleo ^{235}Pa . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules).

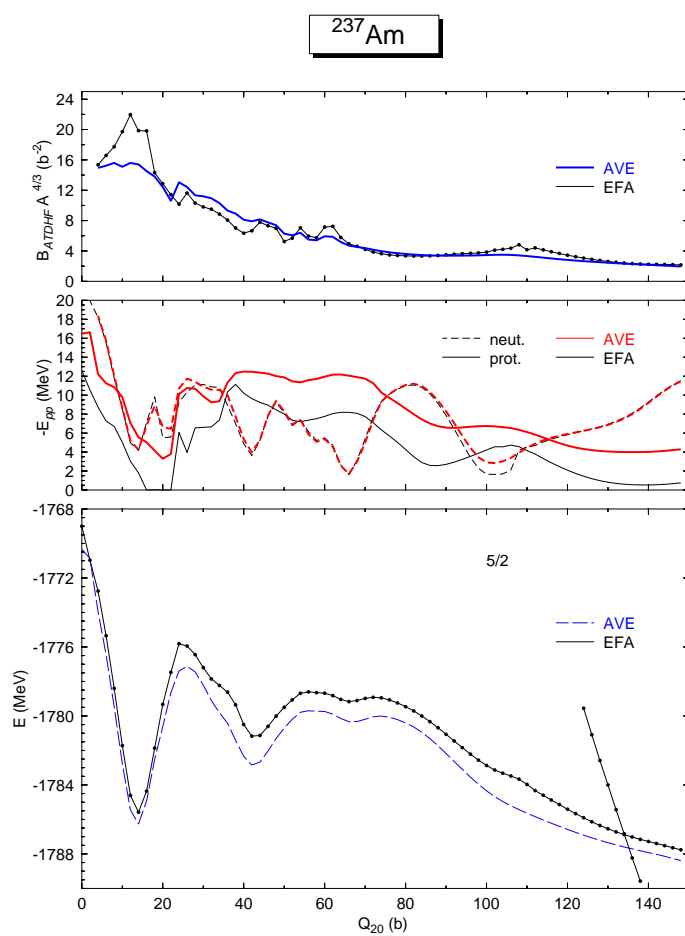


Figura 7.67: Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 5/2$ para el núcleo ^{237}Am . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules).

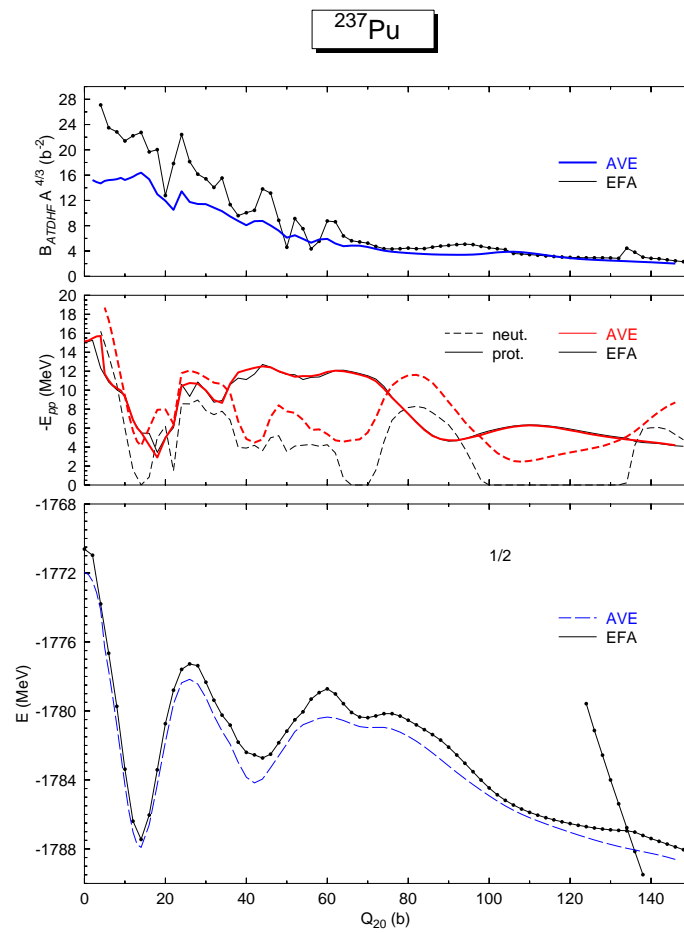


Figura 7.68: Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 1/2$ para el núcleo ^{237}Pu . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules).

7.3.5. Semivida de fisión espontánea

Una vez que se conoce la masa colectiva cuadrupolar y las superficies de energía potencial (PES), ya se tienen todos los ingredientes necesarios para calcular la semivida de la fisión espontánea en la aproximación WKB. Sin embargo, la superficie de energía potencial se tiene que corregir con las correcciones de la energía del punto cero asociadas al movimiento colectivo cuadrupolar, así como con la restauración de la invariancia rotacional (corrección de energía rotacional). Se sabe que la corrección de energía rotacional [7] [49] modifica la topología de la PES, como ya se ha visto, ya que se trata de una función creciente con el momento cuadrupolar. Para la corrección de la energía del punto cero del movimiento colectivo cuadrupolar, se espera un descenso global de la PES, aunque pueden aparecer modificaciones locales de la topología en puntos específicos.

La semivida de fisión espontánea, calculada a través de la aproximación semiclásica WKB, es proporcional a las masas colectivas cuadrupolares $B(Q_{20})$:

$$T_{sf}(s) = 2,86 \cdot 10^{-21} (1 + e^{2S}) \quad (7.20)$$

donde S es la acción

$$S = \int_a^b dQ_{20} \sqrt{2B(Q_{20})(V(Q_{20}) - E_0)} \quad (7.21)$$

$B(Q_{20})$ representa las masas colectivas cuadrupolares, $V(Q_{20})$ la energía potencial y E_0 la energía del estado fundamental.

Las alturas de las barreras de fisión se reducen en unos cuantos MeV cuando se permiten grados de libertad triaxial [7] [49], algo que no se ha tenido en cuenta en este trabajo. Esta reducción, sin embargo, no juega un papel muy importante en la fisión espontánea del núcleo considerado. La primera barrera de fisión baja debido a la triaxialidad, pero por contra, la masa colectiva aumenta, debido a la disminución del apareamiento, por lo que la acción a través del camino triaxial es similar a la acción por el camino axial.

Se han tomado dos prescripciones para evaluar las semividas de fisión espontánea. En la primera de ellas se toma como energía total, la energía HFB-EFA de la configuración que da el mínimo en el estado fundamental. La segunda forma de evaluar la energía total es tomando para cada valor de la deformación cuadrupolar la configuración que tiene menor energía HFB-EFA. De esta forma se saltará entre las PES con distintos valores de j_z según éstas se vayan cruzando. Desde un punto de vista físico esto podría corresponder a una desintegración γ que se encarga de la transferencia de momento angular. Los resultados para el primer método se muestran en el cuadro 7.13. Mientras que los resultados del método 2 están en el cuadro 7.12. Para evaluar el efecto par-impar de las semividas, se van a realizar comparaciones entre los resultados bloqueados y los resultados promedio, que como ya se dijo, tienen la estructura de los cálculos pares pero ajustados a un número de partículas impar.

Las semividas de fisión espontánea son algunos órdenes de magnitud mayores en núcleos con A impar que en núcleos con A par. Los motivos de este hecho son varios:

Núcleo	$t_{sf} (s)$	$t_{sf}^{RC} (s)$	$t_{sf}^{exp} (s)$ [55]
^{234}U	$1,2 \times 10^{31}$	$1,9 \times 10^{19}$	$4,5 \times 10^{23} s$
^{235}Pa	$4,2 \times 10^{43}$	$1,4 \times 10^{31}$	
^{235}U	$7,8 \times 10^{51}$	$5,5 \times 10^{37}$	$3,2 \times 10^{26} s$
^{235}Np	$7,7 \times 10^{43}$	$2,3 \times 10^{34}$	
^{236}U	$8,1 \times 10^{32}$	$3,3 \times 10^{23}$	$7,6 \times 10^{23} s$
^{237}Am	$1,2 \times 10^{44}$	$2,9 \times 10^{23}$	
^{237}Pu	$3,1 \times 10^{44}$	$2,4 \times 10^{34}$	

Cuadro 7.11: Valores de las semividas de fisión espontánea evaluadas tomando el método 1. En la segunda columna se muestran los datos correspondientes a los resultados sin corrección rotacional, mientras que en la tercera columna aparecen los resultados cuando se tiene en cuenta la corrección rotacional. En la cuarta columna están los resultados experimentales.

Núcleo	$t_{sf} (s)$	$t_{sf}^{RC} (s)$	$t_{sf}^{exp} (s)$ [55]
^{234}U	$1,2 \times 10^{31}$	$1,9 \times 10^{19}$	$4,5 \times 10^{23} s$
^{235}Pa	$3,4 \times 10^{42}$	$3,3 \times 10^{29}$	
^{235}U	$1,0 \times 10^{45}$	$2,3 \times 10^{31}$	$3,2 \times 10^{26} s$
^{235}Np	$2,2 \times 10^{42}$	$4,3 \times 10^{31}$	
^{236}U	$8,1 \times 10^{32}$	$3,3 \times 10^{23}$	$7,6 \times 10^{23} s$
^{237}Am	$2,8 \times 10^{33}$	$3,2 \times 10^{24}$	
^{237}Pu	$2,4 \times 10^{38}$	$3,1 \times 10^{28}$	

Cuadro 7.12: Valores de las semividas de fisión espontánea evaluadas tomando el método 2. En la segunda columna se muestran los datos correspondientes a los resultados sin corrección rotacional, mientras que en la tercera columna aparecen los resultados cuando se tiene en cuenta la corrección rotacional. En la cuarta columna están los resultados experimentales.

1) Las inercias colectivas $B(Q_{20})$ son mayores, ya que la energía de apareamiento en los núcleos con A impar es menor. Esta tendencia se puede observar en las gráficas de la figura 7.69.

2) La energía de especialización: Hay una diferencia sustancial entre los resultados de los núcleos pares y los de los impares. Dicha diferencia se puede ver en las energías de los resultados del núcleo par (curva en rojo de la figura 7.70) y las energías de los resultados bloqueados (curvas negra y azul de la misma figura 7.70).

En el esquema del método WKB, $t_{1/2}^{sf}$ está dado por el producto de la exponencial por una cantidad del orden de $3 \cdot 10^{-21} s$. El valor experimental [55] del $t_{1/2}^{sf}$ para ^{234}U es $t_{1/2}^{sf} = 4,48 \cdot 10^{23} s$ y por tanto debe ser una exponencial de la acción del orden de 10^{44} o una acción del orden de 100 para ^{234}U para que reproduzca el dato experimental. La acción es proporcional a la raíz cuadrática de la masa colectiva, y por tanto se espera un incremento de esta cantidad para ^{235}U en comparación con los valores de ^{234}U como consecuencia de

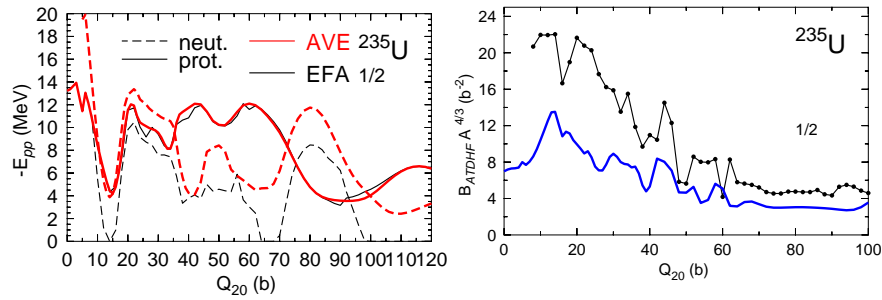


Figura 7.69: Energía de apareamiento y masas colectivas del ^{235}U para explicar el aumento en la semivida de la fisión espontánea en los núcleos impares.

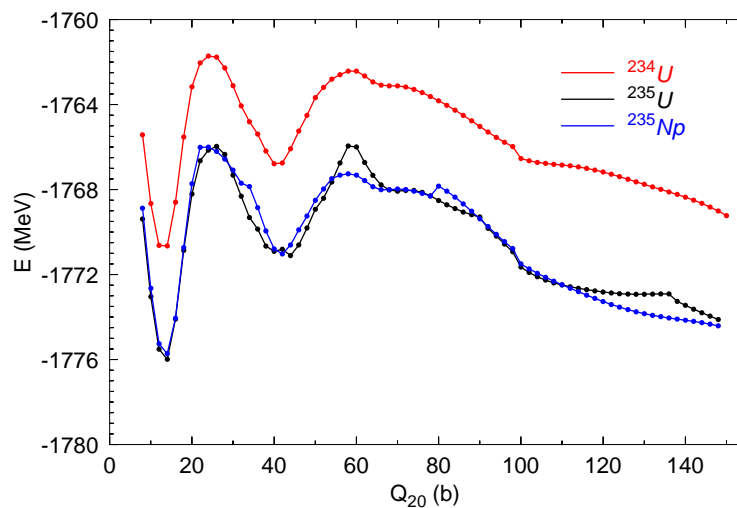


Figura 7.70: PES del ^{234}U en rojo, juntos con los resultados EFA de la configuración de menor energía del ^{235}U , en negro y ^{235}Np , en azul.

Núcleo	$t_{sf} (s)$	$t_{sf}^{RC} (s)$
^{235}Pa	$1,1 \times 10^{34}$	$1,8 \times 10^{24}$
^{235}U	$7,5 \times 10^{42}$	$3,6 \times 10^{31}$
^{235}Np	$1,4 \times 10^{27}$	$4,5 \times 10^{17}$
^{237}Am	$1,6 \times 10^{21}$	$3,6 \times 10^{14}$
^{237}Pu	$8,9 \times 10^{26}$	$6,2 \times 10^{18}$

Cuadro 7.13: Valores de las semividas de fisión espontánea evaluadas con los resultados promedio. Dicho resultados se encuentran con las ecuación HFB para núcleos pares construyendo el valor medio de las partículas a un número impar. En la segunda columna se muestran los datos correspondientes a los resultados sin corrección rotacional, mientras que en la tercera columna aparecen los resultados cuando se tiene en cuenta la corrección rotacional.

la “energía de especialización” y el parámetro de la masa colectiva cuadrupolar mejorado. Si se supone que la masa colectiva de ^{235}U es un factor 1.2 mayor que la masa colectiva de ^{234}U , la acción de ^{235}U se espera del orden de $\sqrt{1,2} \times 100 = 109,5$ y el factor “hindrance” sería entonces del orden de 10^4 como se observa experimentalmente. En los cálculos de la configuración con $j_z = 7/2$ (la que corresponde con el estado fundamental) la masa colectiva es un factor 1.3 mayor que el valor de referencia para ^{234}U , lo cual está en acuerdo con las estimaciones anteriores.

Se puede concluir que el factor *hindrance* en las semividas de la fisión espontánea de los núcleos impares no se debe sólo a la energía de “especialización”, sino que está fuertemente influenciado por el aumento de la masa colectiva cuadrupolar debido a la reducción de los correlaciones de apareamiento inducidas por el nucleón desapareado [47].

Tras el estudio de las barreras de fisión de estos núcleos se llega a las siguientes conclusiones:

1. Las barreras de fisión son mayores en los núcleos impares que en los núcleos pares. Lo cual se corresponde con los resultados experimentales.
2. La energía de apareamiento en estos núcleos es menor que para los núcleos pares en el canal bloqueado.
3. Las masas colectivas deducidas de la ATDHFB son mayores que las masas de los núcleos pares. Según la deducción teórica de esta magnitudes en su relación con la energía de apareamiento, dicho resultado es el esperado.
4. De las conclusiones anteriores se concluye que las semividas de los núcleos impares son mayores que en el caso de núcleos pares. Dicha evaluación se obtiene a partir de la aproximación WKB estudiando los comportamientos de las variables anteriores, energía de apareamiento y masas colectivas.
5. En realidad los resultados de las semividas obtenidos, son muy superiores a los obtenidos experimentalmente. Esta gran diferencia se puede deber a la falta de triaxialidad que rebajan la altura de la primera barrera de fisión. La corrección rotacional o la ZPE también modifican sustancialmente el resultado.

7.4. Cadena de desintegración α

La existencia de núcleos de vida media grande, más allá de la región de los actínidos es muy importante para entender los límites de estabilidad de la materia. El descubrimiento teórico en los años sesenta de nuevos números mágicos que podían crear una isla de estabilidad alrededor de $Z = 115$ y $N = 184$ ha sido una de las predicciones de modelos de estructura nuclear mas remarcables. Así se consiguió abrir un nuevo campo, los elementos superpesados (SHE). Desde sus primeros pasos se han realizado grandes esfuerzos para la síntesis experimental de los núcleos transactínidos, y tanto en GSI como en Dubna se han llegado a producir isótopos con $Z > 104$. De forma paralela se ha realizado un gran trabajo para conseguir deducir las propiedades de estos elementos superpesados utilizando diferentes aproximaciones teóricas [34].

Los modelos teóricos tomados para deducir las propiedades de los elementos superpesados están divididos en dos categorías: los que se basan en métodos macroscópicos-microscópicos (M-m) que emplean la técnica de corrección de capas de Strutinski, y las aproximaciones microscópicas que parten de varias formas de la interacción nucleón-nucleón. Hay muchas versiones del método M-m que han conseguido un alto grado de sofisticación y cuyos resultados a menudo están en excelente acuerdo con los datos experimentales. Las aproximaciones microscópicas han sido aplicadas extensivamente a los núcleos superpesados en la última década. Para este tipo de aproximaciones, el campo medio nuclear se deriva autoconsistentemente de la interacción a dos cuerpos efectiva nucleón-nucleón como la fuerza de Skyrme o de Gogny o de los lagrangianos efectivos relativistas para intercambio de mesones. Los efectos cuánticos se incluyen desde un principio de una manera única. Además se pueden incorporar correlaciones más allá de campo medio de una manera autoconsistente. Debido a la complejidad de las interacciones nucleón-nucleón, los métodos microscópicos no han llegado a conseguir los niveles de precisión de los métodos M-m para reproducir propiedades nucleares globales conocidas.

Muchos núcleos de la región SHE conocidos experimentalmente son núcleos impares. Por ello se han extendido los cálculos a cadenas de desintegración α de núcleos con neutrones o protones impares.

Características de los cálculos

Para estos cálculos se ha tomado una base con $MZMAX=12$ y $q=1.0$. Se ha realizado una optimización de los parámetros de la base para cada núcleo par utilizado, ya que para obtener el esquema de niveles a bloquear se han tomado los dos núcleos pares vecinos.

Tras resolver las ecuaciones HFB para los núcleos pares, se han bloqueado los tres estados de más baja energía para cada j_z , para asegurar que se obtienen las configuraciones de más baja energía. Estos cálculos se han realizado sin más ligadura que la que fija el centro de masas en el origen. De este modo se obtienen los espectros de energía del estado fundamental para cada núcleo impar.

Un hecho evidente al observar algunos de esos espectros es la ruptura de paridad debida al grado de libertad octupolar. Por este motivo se ha tenido que considerar, para algunos núcleos, un estudio de octupolaridad basado en la técnica de proyección después de la variación con ligadura, como el que ya se utilizó anteriormente con el Radio y Torio.

Este estudio se ha realizado para los núcleos ^{221}Fr , ^{225}Ac , ^{229}Pa y ^{233}Np .

La secuencia de procesos que se ha llevado en este estudio ha sido:

1. Se han realizado los cálculos de los núcleos pares vecinos optimizando la base (estado fundamental únicamente)
2. Después se han calculado los núcleos impares empleando los esquemas de niveles de cuasipartículas de los dos núcleos pares vecinos (de nuevo, únicamente para el estado fundamental)
3. Por último se realiza la proyección a buena paridad de los estados fundamentales de cada configuración.
4. Para los núcleos ^{221}Fr , ^{225}Ac , ^{229}Pa y ^{233}Np por la intuición que se tiene de que puedan tener deformación octupolar estable, se le aplica la técnica de PAV con ligadura en el momento octupolar.

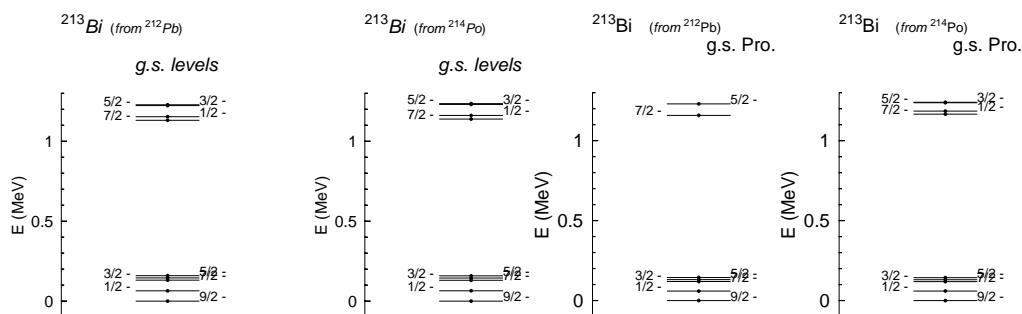


Figura 7.71: Espectro del estado fundamental del ^{213}Bi . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. Experimentalmente [55] se sabe que el estado fundamental es $\frac{9}{2}^-$ igual que lo predicho por EFA.

En todos los espectros resultantes del cálculo EFA, los niveles están denotados por su espín y paridad. Cuando dichas paridades están rotas aparece el símbolo # y a su lado se muestra entre paréntesis la paridad de ese mismo estado para $Q_{30} = 0$.

De los resultados que se observan en la figura 7.71, se deduce que el núcleo ^{213}Bi no está deformado octupolarmente. Partiendo de cualquiera de sus núcleos pares vecinos, el núcleo mágico ^{212}Pb o el ^{214}Po se obtiene el mismo espectro. Experimentalmente [55] se sabe que el estado fundamental es $\frac{9}{2}^-$, lo cual concuerda perfectamente con lo predicho por EFA. Aunque todos los estados deducidos tienen buena paridad negativa, se ha querido aplicar la proyección a paridad negativa, ya que, recordando lo visto en el capítulo 5, la proyección a paridad negativa de un estado con buena paridad negativa es equivalente a aplicar la proyección que restaura la proyección a paridad de número impar. De los dos conjuntos de estados se observa que la estructura y orden de los estados sigue siendo el mismo.

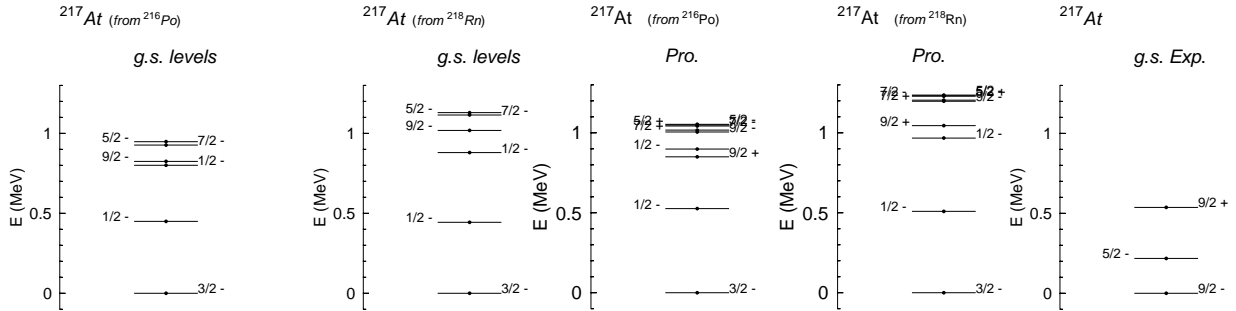


Figura 7.72: Espectro del estado fundamental del ^{217}At . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados.

En la figura 7.72 se muestran los espectros obtenidos para el ^{217}At . De este núcleo se puede extraer la misma conclusión que para el Bismuto, ya que en campo medio EFA las paridades están bien definidas. La única diferencia destacable es que en este caso dependiendo del núcleo par del que se parta, la parte superior de espectro cambia un poco. Esta diferencia puede estar debida a la optimización de los parámetros del oscilador que se llevaron a cabo en los núcleos pares. Experimentalmente [55] el estado fundamental es $\frac{9}{2}^-$. Para obtener ese estado en los espectros teóricos, hay que subir 800 keV tanto en los resultados EFA como en los proyectados.

Para el núcleo ^{221}Fr , como ya se dijo, se ha llevado a cabo el procedimiento de PAV con ligadura en el momento octupolar. En la figura 7.73 están representadas las superficies de energía potencial obtenidas bloqueando los primeros estado de cuasipartícula bloqueado. Se observa que la deformación para la que se obtiene la energía mínima en todas las configuraciones es tan grande que la proyección no obtiene ningún mínimo más profundo. Esto quiere decir que aunque sólo se hubiera calculado el espectro del estado fundamental y se hubiera proyectado sin más, se habría obtenido el mismo resultado. Aun así es mejor realizar este estudio para asegurar el resultado.

De la figura 7.73 se deducen los espectros EFA y proyectados, que como se observa en la figura 7.74 son casi idénticos. Experimentalmente se sabe que el estado fundamental es $\frac{5}{2}^-$, que es un estado que en la predicción aparece a 1 MeV del estado fundamental teórico.

El mismo estudio PAV con ligaduras se ha realizado para el ^{225}Ac . En la figura 7.75 se muestran los resultados que se han obtenidos. Se ve que sólo la configuración $\frac{1}{2}$ obtiene otro mínimo en energía más profundo que el de EFA. Eso significa que aunque el orden de estados en el espectro es el mismo, la diferencia de energías se reduce. Los espectros

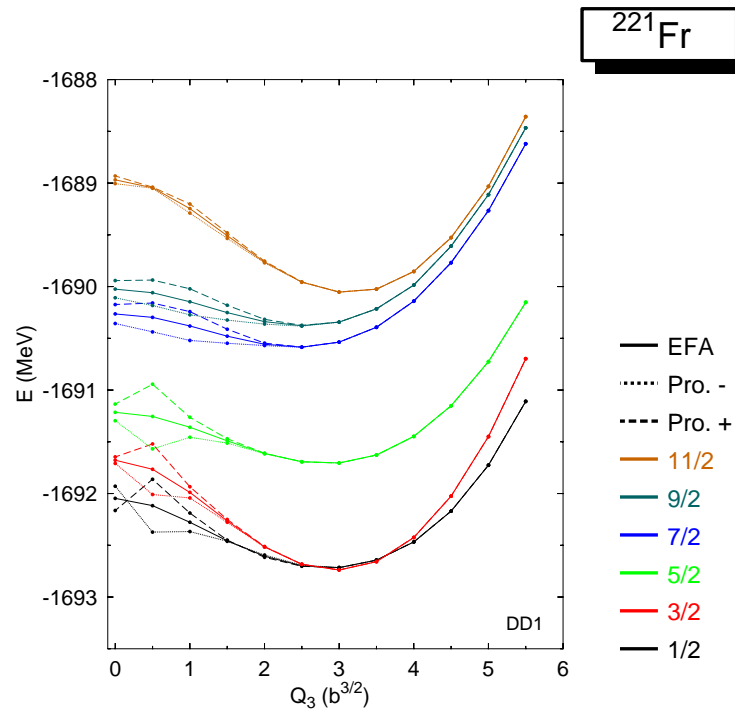


Figura 7.73: Superficies de energía potencia para el ^{221}Fr . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a buen paridad tanto positiva como negativa.

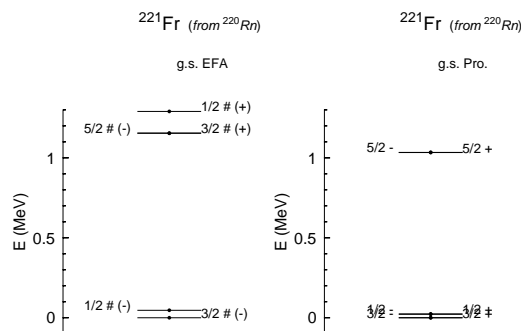


Figura 7.74: Espectro del estado fundamental del ^{221}Fr . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{220}Rn . A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. Experimentalmente el estado fundamental es $\frac{5}{2}^-$.

obtenidos se muestran en la figura 7.76. Se observa un buen acuerdo con los resultados experimentales [55], ya que se reproducen los cuatro estados más bajos en energía con la única diferencia de que los resultados proyectados predicen estados $\frac{3}{2}^{+/-}$ y $\frac{5}{2}^{+/-}$.

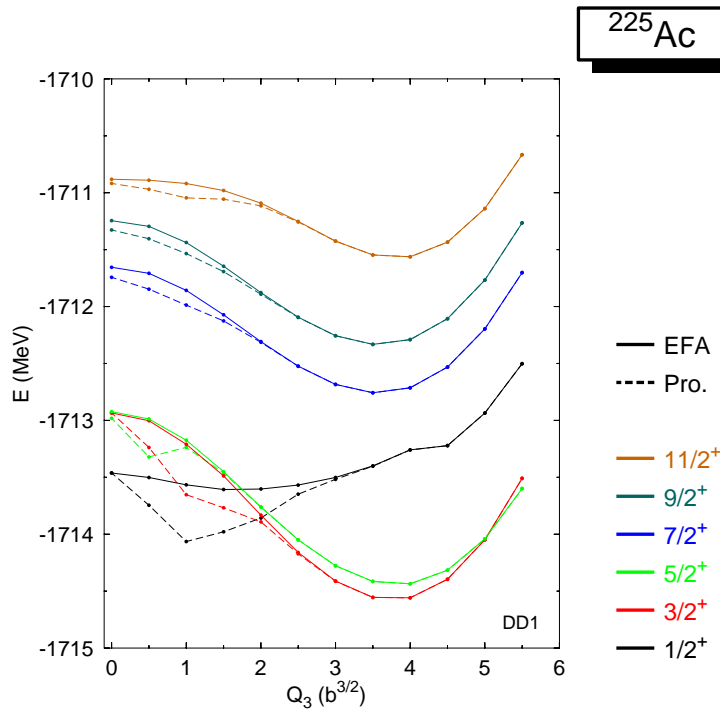


Figura 7.75: Superficies de energía potencia para el ^{225}Ac . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a paridad positiva.

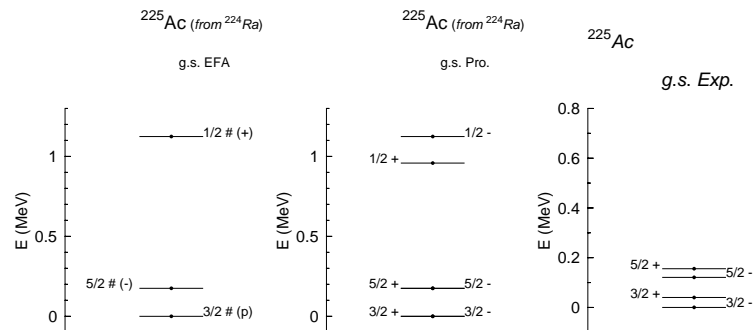


Figura 7.76: Espectro del estado fundamental del ^{225}Ac . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{224}Ra . En el centro está el espectro de los niveles proyectados y a la derecha el espectro experimental.

Debido a la posibilidad de que el fenómeno de la octupolaridad aparezca también en el núcleo ^{229}Pa , se han proyectado a buena paridad los resultados constreñidos en Q_{30} obtenidos en EFA. La figura 7.77 muestra las superficies de energía potencial que resultan del bloqueo de las diversas configuraciones. En este caso se observa una mejora en energía para los valores de $j_z = \frac{1}{2}$ y $\frac{3}{2}$. Los espectros que se deducen de ahí están mostrados en la figura 7.78. El estado fundamental experimental [55] es un doblete $\frac{5}{2}^{+/-}$ que aparece en el espectro teórico como primeros estados excitados.

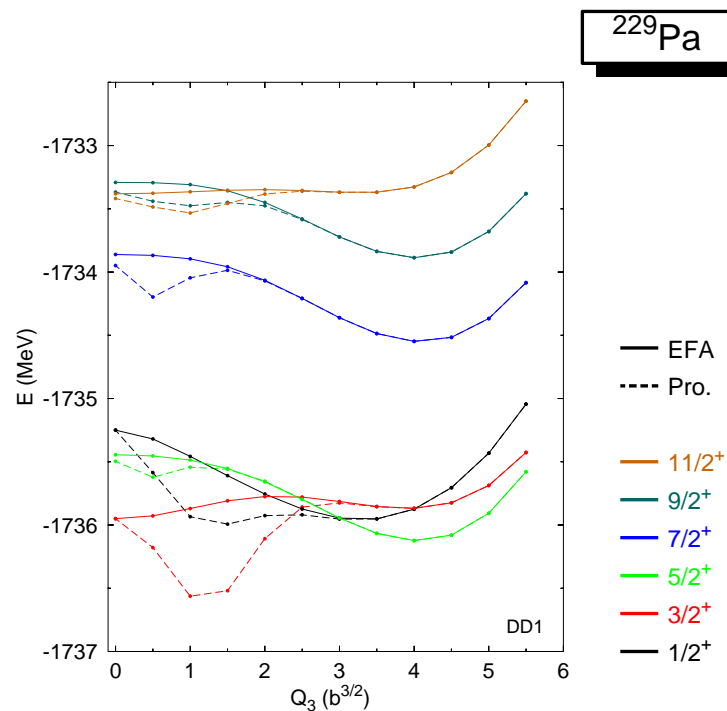


Figura 7.77: Superficies de energía potencia para el ^{229}Pa . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a paridad positiva.

El último caso del que se tienen nociones que pueda necesitar un estudio más preciso de proyección es el ^{233}Np . Y por los resultados mostrados en la figura 7.79, se ve que ha sido acertado, ya que de haber proyectado únicamente el estado fundamental obtenido en EFA se hubiera ignorado una ganancia de energía sustancial que provoca un reordenamiento de los estados. Según los espectros de la figura 7.80, el estado más bajo corresponde a un doblete $\frac{5}{2}^{+/-}$ que es exactamente lo que predice la EFA proyectada. Estos resultados nos muestran el gran acierto de la aproximación EFA con la proyección a paridad para tratar núcleos impares en la región de los superpesados.

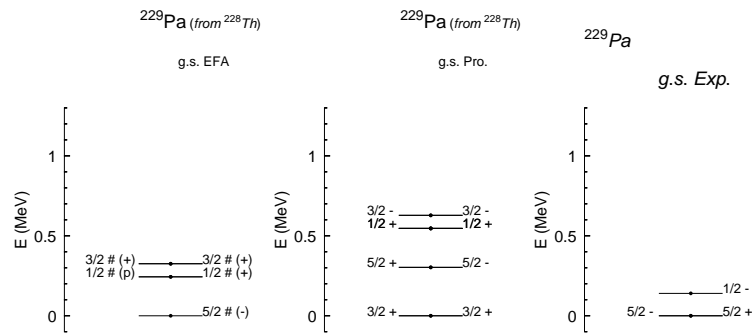


Figura 7.78: Espectro del estado fundamental del ^{229}Pa . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{228}Th . En el centro está el espectro de los niveles proyectados y a la derecha el espectro experimental.

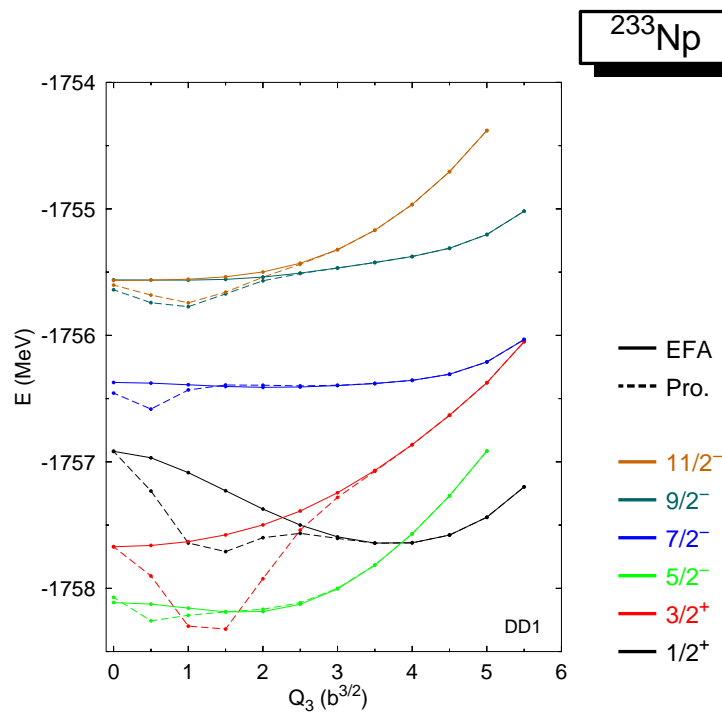


Figura 7.79: Superficies de energía potencia para el ^{233}Np . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a paridad positiva.

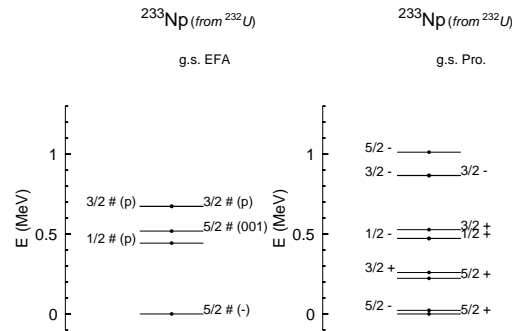


Figura 7.80: Espectro del estado fundamental del ^{233}Np . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{232}U . A la derecha está el espectro de los niveles proyectados. Experimentalmente se encuentra como estado fundamental un doblete de $\frac{5}{2}^+$, $\frac{5}{2}^-$.

Al ir avanzando por la tabla periódica hasta núcleos más pesados, llegamos a zonas donde la posibilidad de conseguir deformación octupolar va disminuyendo. Ésto es lo que pasa con el ^{237}Am donde sólo algunas configuraciones poseen deformación octupolar. En la figura 7.81 se muestran los espectros teóricos deducidos.

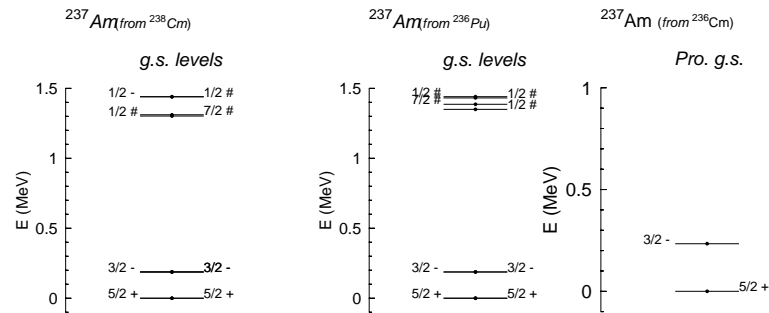


Figura 7.81: Espectro del estado fundamental del ^{237}Am . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. El estado fundamental experimental es $\frac{5}{2}^-$.

Para los dos últimos núcleos de esta cadena de desintegración se han calculado únicamente los estados fundamentales. Los espectros para el ^{241}Bk se muestran en la figura 7.82 y los del ^{245}Es en la figura 7.83. En ambos casos se puede ver que hay un buen acuerdo con los estados fundamentales experimentales [55].

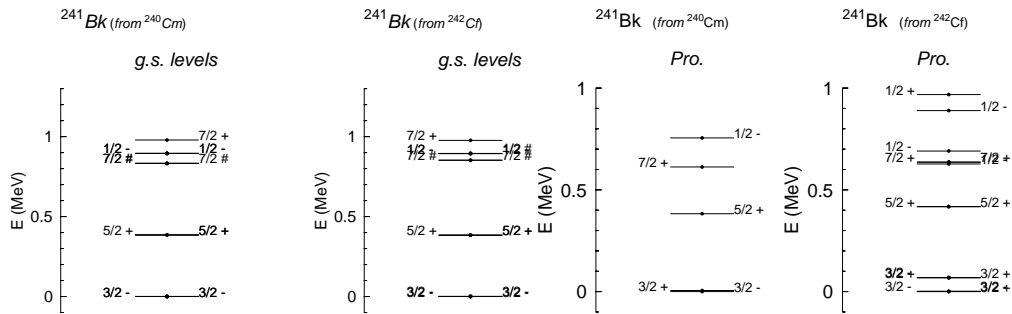


Figura 7.82: Espectro del estado fundamental del ^{241}Bk . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. Según los datos experimentales el estado fundamental es $\frac{7}{2}^+$ y a 51 keV aparece un estado $\frac{3}{2}^-$.

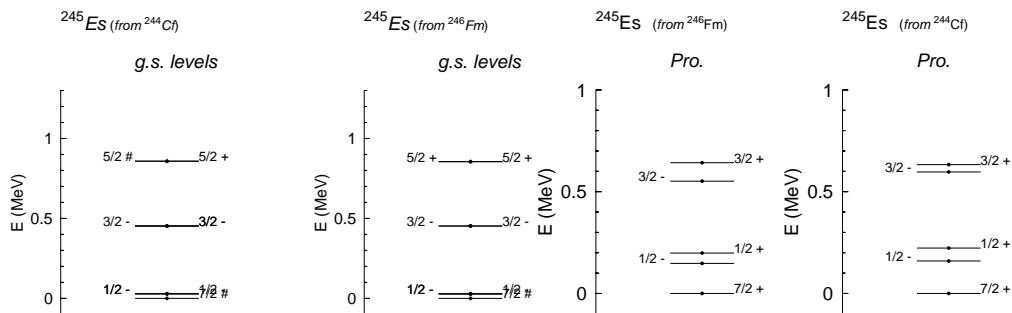
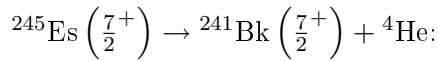


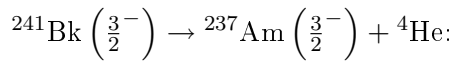
Figura 7.83: Espectro del estado fundamental del ^{245}Es . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. El estado fundamental experimental es $\frac{3}{2}^-$.

Una vez que ya se han determinado los espectros de los estados fundamentales, ya sólo falta evaluar los valores de Q_α como las diferencias de energía de ligadura entre el estado fundamental del núcleo padre y el estado con el mismo espín y paridad en el núcleo hijo. A veces este estado puede ser el estado fundamental, y otras veces ser un estado excitado.

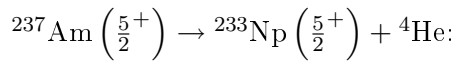
A continuación se muestran las energías de ligadura de cada uno de los estados que interviene en la desintegración α :



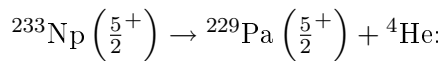
	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
${}^{245}\text{Es} \left(\frac{7^+}{2} \right)$	-1822.54	-1822.95
${}^{241}\text{Bk} \left(\frac{7^+}{2} \right)$	-1801.18	-1801.54



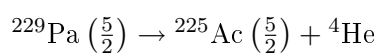
	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
${}^{241}\text{Bk} \left(\frac{3^-}{2} \right)$	-1802.15	-1802.19
${}^{237}\text{Am} \left(\frac{3^-}{2} \right)$	-1780.64	-1780.62



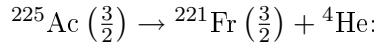
	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
${}^{237}\text{Am} \left(\frac{5^+}{2} \right)$	-1780.83	-1780.85
${}^{233}\text{Np} \left(\frac{5^+}{2} \right)$	-1759.20	-1759.20



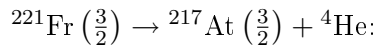
	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
${}^{233}\text{Np} \left(\frac{5^+}{2} \right)$	-1759.20	-1759.20—
${}^{229}\text{Pa} \left(\frac{5^+}{2} \right)$	-1737.21	-1737.21



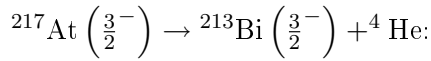
	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
$^{229}\text{Pa} \left(\frac{5}{2}\right)$	-1737.21	-1737.21
$^{225}\text{Ac} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1715.23	-1715.23



	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
$^{225}\text{Ac} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1715.40	-1715.40
$^{221}\text{Fr} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1693.20	-1693.20



	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
$^{221}\text{Fr} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1693.20	-1693.20
$^{217}\text{At} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1671.40	-1671.50



	$E^{EFA} (MeV)$	$E^{Pro.} (MeV)$
$^{217}\text{At} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1671.40	-1671.50
$^{213}\text{Bi} \left(\frac{3}{2}\right)$	-1652.43	-1652.54

Núcleo	$Q_{\alpha}^{exp.}$	Q_{α}^{EFA}	$Q_{\alpha}^{pro.}$
^{217}At	7.2018	8.3116	8.3161
^{221}Fr	6.4576	5.4672	5.5699
^{225}Ac	5.9353	5.0731	5.0730
^{229}Pa	5.8365	5.2953	5.2954
^{233}Np	5.700	5.2767	5.2767
^{237}Am	6.250	5.6422	5.6211
^{241}Bk	6.860	5.7678	5.7016
^{245}Es	7.909	5.9121	5.8700

Cuadro 7.14: Valores de Q_{α} para la cadena de desintegración α . En la segunda columna están los datos experimentales y en las siguientes aparecen los resultados obtenidos por EFA y tras la proyección respectivamente.

En todos los resultados del factor Q_{α} mostrados en el cuadro 7.14 se encuentra un buen acuerdo, aunque haya casos más acertados como el ^{233}Np y otros menos acertados como el ^{245}Es .

En general se puede concluir que la técnica de proyección después de la variación con ligaduras, basada en la EFA es un buen método para describir núcleos en la región de los núcleos superpesados. Esto nos permite tener una herramienta muy válida para estudiar zonas experimentalmente conocidas y regiones exóticas que permitan inspeccionar nuevos límites de la estabilidad nuclear.

Capítulo 8

Conclusiones

El fruto fundamental que se extrae de este trabajo es que hay una técnica solvente y justificada que permite tratar núcleos impares de forma microscópica, la Aproximación de Llenado Uniforme o *Equal Filling Approximation*.

Gracias a la justificación teórica que se ha mostrado, su uso está totalmente justificado y no sólo para campo medio; también se puede mejorar su descripción utilizando técnicas más allá de campo medio, como la técnica de proyección, aquí utilizada.

Por medio de la proyección que restaura la proyección a buena paridad de número se ha podido evaluar la bondad de la EFA, ya que de la forma que toma el operador densidad en el límite de la EFA se deducen cuatro contribuciones que rompen la paridad de número; dos de ellas poseen un número par de partículas y otras dos contienen un número impar de partículas. Del escaso efecto que tienen los resultados proyectados en referencia a los resultados con ruptura de paridad de número, se deduce que la EFA es una aproximación fiable.

Un pilar fundamental de cualquier teoría de campo medio lo compone la interacción nuclear. En este trabajo se ha tomado la interacción efectiva de alcance finito y dependiente de la densidad de Gogny D1S. Desde sus primeros pasos y a través de las distintas parametrizaciones que ha tenido, se ha demostrado que es una buena elección para asegurarse unos resultados acertados.

Dentro del gran abanico de posibilidades de estudio que presenta la EFA, se ha estudiado el fenómeno de la octupolaridad estable para los isótopos impares del Radio y Torio, la fisión espontánea en núcleos impares de la región de los actínidos, y una cadena de desintegración α que parte de elementos superpesados.

Se ha encontrado una descripción razonable para los estados fundamentales de los núcleos ^{235}U , ^{235}Np , ^{235}Pa , ^{237}Am y ^{237}Pu y se han hecho predicciones para el espín y paridad de los estados isoméricos de fisión. También se ha analizado el efecto de la energía de especialización y la reducción de las correlaciones de apareamiento en la vida media de fisión para explicar el factor *hindrance* de esta cantidad. Se ha visto que ambos efectos son relevantes en el proceso que lleva a la escisión del núcleo.

Es importante notar que no se ha tenido en cuenta la triaxialidad en estos cálculos. Se

sabe que se produce una reducción en la altura de la primera barrera cuando se introduce el grado de libertad triaxial.

La existencia de bandas de paridad alterna es una evidencia de la asimetría de reflexión en el núcleo. Por la importancia de este fenómeno en regiones concretas de la tabla periódica se ha decidido estudiar este carácter del núcleo en casos impares. Del estudio de la octupolaridad en los isótopos del Radio y Torio: $^{221}\text{Ra} - ^{231}\text{Ra}$ y $^{221}\text{Th} - ^{231}\text{Th}$ se extrae la necesidad de realizar la restauración de la simetría de la paridad, ya que por medio de ella se puede encontrar modificaciones sustanciales en los espectros de niveles. Con ello se ha demostrado, de acuerdo a las comparaciones con los datos experimentales que el método de proceder: EFA con ligaduras en $Q_3 +$ proyección a buena paridad, es un buen método para abordar el fenómeno de la deformación octupolar.

Para poner a prueba la aproximación EFA en otro ámbito, distinto a los anteriores, se ha elegido la región de núcleos superpesados. El procedimiento para dicho estudio ha sido el habitual, es decir, una vez obtenidos los niveles de cuasipartículas a través de los núcleos pares se seleccionan los distintos estados j_z y de sus resultados se crea el espectro de cada núcleo impar. Como objetivo final del estudio se pretendían evaluar los factores Q_α de los núcleos de la cadena de desintegración α partiendo del ^{245}Es y llegando hasta el ^{213}Bi .

No sólo los valores de Q_α teóricos han sido satisfactorios, también los espectros de los estados fundamentales de cada núcleo guardan un buen acuerdo con los datos experimentales. De esta forma se justifica la EFA como una herramienta sólida en el estudio de propiedades exóticas de esta región de núcleos.

Como perspectivas de este trabajo se encuentra el estudio de espectroscopia de elementos superpesados, ya que puede servir de ayuda para complementar los análisis experimentales que actualmente se están llevando a cabo, como por ejemplo en el Mendelevio ($Z=101$) o Laurencio ($Z=103$) y en otras regiones.

En cuanto a la fisión todavía existen multitud de núcleos interesantes que estudiar. Con respecto al estudio sistemático de la fisión hay que decir que correcciones tan relevantes como la corrección rotacional deben ser estudiadas más en detalle. Hasta ahora su evaluación ha sido común para todas las configuraciones, por lo que una posible mejora será derivar su expresión con una dependencia en el estado de cuasipartícula bloqueado.

Otra perspectiva interesante es extender las ideas de la EFA al campo del Método de la Coordenada Generadora GCM para estudiar grados de libertad colectivos de gran amplitud en núcleos impares.

Apéndice A

Base Axial

En este trabajo se ha utilizado la base axial desarrollada en la base de las funciones de onda del oscilador armónico. A continuación se muestran las expresiones de las funciones de onda, así como las simetrías y propiedades de dicha base.

La base axial está caracterizada por la proyección del momento angular total Ω , la proyección del momento angular orbital m , la proyección del espín m_s , el número cuántico principal del oscilador en 2D n_\perp y el número cuántico principal del oscilador en 1D n_z .

$$|\Omega \ m \ n_\perp \ n_z\rangle = |m \ n_\perp\rangle |n_z\rangle |m_s\rangle \quad (\text{A.0.1})$$

$$\Omega = m + m_s \quad (\text{A.0.2})$$

La función de onda del oscilador armónico en dos dimensiones tiene la expresión:

$$\langle \vec{r}_\perp | m \ n_\perp \rangle = \mathcal{N}_{n_\perp |m|} \left(\frac{r_\perp}{b_\perp} \right)^{|m|} L_{n_\perp}^{|m|} \left(\frac{r_\perp^2}{b_\perp^2} \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{r_\perp}{b_\perp} \right)^2} e^{im\varphi} \quad (\text{A.0.3})$$

donde $L_{n_\perp}^{|m|} \left(\frac{r_\perp^2}{b_\perp^2} \right)$ los polinomios de *Laguerre*

La parte de la función de onda en una dimensión es:

$$\langle z | n_z \rangle = \mathcal{N}_{n_z} H_{n_z} \left(\frac{z}{b_z} \right) e^{-\frac{1}{2} \left(\frac{z}{b_z} \right)^2} \quad (\text{A.0.4})$$

siendo $H_{n_z} \left(\frac{z}{b_z} \right)$ los polinomios de *Hermite*.

La manera que se ha utilizado para truncar la dimensión de la base, es poniendo una cota máxima de la siguiente forma:

$$q(2n_{\perp} + |m|) + n_z \leq N_o \quad (\text{A.0.5})$$

donde $q = \frac{\omega_{\perp}}{\omega_z}$ es el parámetro que indica la deformación de la base.

De este modo, el valor máximo de m será $|m| = \frac{N_o}{q} \equiv MZMAX$ y su rango de valores:

$$|m| = 0, \dots, MZMAX \quad (\text{A.0.6})$$

Para el número cuántico n_{\perp} se tiene:

$$q(2n_{\perp max} + |m|) \leq N_o \quad (\text{A.0.7})$$

$$2n_{\perp max} + |m| \leq MZMAX \quad (\text{A.0.8})$$

$$n_{\perp} = 0, \dots, \frac{MZMAX - |m|}{2} \quad (\text{A.0.9})$$

Por último, los valores posibles de n_z serán:

$$n_z = 0, \dots, N_o - q(2n_{\perp} + |m|) \quad (\text{A.0.10})$$

o bien:

$$n_z = 0, \dots, q(MZMAX - (2n_{\perp} + |m|)) \quad (\text{A.0.11})$$

Las simetrías autoconsistentes impuestas a la simetría axial son las siguientes.

Invariancia temporal El operador de inversión temporal se puede escribir como:

$$\tau = K_0 e^{-i\pi S_y} \quad (\text{A.0.12})$$

donde $e^{-\pi S_y} = -i\sigma_y = -i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ y $e^{-\pi S_y} \chi_{m_s} = (-1)^{\frac{1}{2}-m_s} \chi_{-m_s}$

K_0 es el operador complejo conjugado:

$$K_0 |m \ n_{\perp} \ n_z\rangle = |-m \ n_{\perp} \ n_z\rangle \quad (\text{A.0.13})$$

$$\tau |\Omega \ m \ n_{\perp} \ n_z\rangle = |-\Omega \ -m \ n_{\perp} \ n_z\rangle \sigma_{m_s} \quad (\text{A.0.14})$$

siendo $\sigma_{m_s} = (-1)^{\frac{1}{2}-m_s}$

Paridad Como ya se vio en el capítulo 5, al hablar de la proyección a buena paridad, el operador paridad se denota por $\hat{\Pi}$. Sus autovalores en la base del oscilador armónico axial son:

$$\hat{\Pi} |\Omega \ m \ n_{\perp} \ n_z\rangle = (-1)^{m+n_z} |\Omega \ m \ n_{\perp} \ n_z\rangle \quad (\text{A.0.15})$$

Simplex El operador de Simplex viene dado por la expresión:

$$\mathcal{S} = \hat{\Pi} e^{-i\pi j_y} \quad (\text{A.0.16})$$

La exponencial $e^{-i\pi j_y}$ actuando sobre la función de onda de espín χ_{m_s} da $\sigma_{m_s} \chi_{\overline{m_s}}$ y actuando sobre la función de onda espacial invierte las coordenadas espaciales $x \rightarrow -x$, $z \rightarrow -z$, $y \rightarrow y$. Por tanto, el operador de Simplex \mathcal{S} sólo cambia la parte espacial $y \rightarrow -y$ y el resto lo deja igual. El cambio $y \rightarrow -y$ deja r_{\perp} igual y cambia $\varphi \rightarrow -\varphi$, de forma que:

$$\mathcal{S} |\Omega \ m \ n_{\perp} \ n_z\rangle = \sigma_{m_s} |-\Omega \ -m \ n_{\perp} \ n_z\rangle \quad (\text{A.0.17})$$

Aplicando estos tres operadores a cada estado de la base, se debe encontrar el estado correspondiente.

Los estados $|k\rangle$ y $|\overline{k}\rangle$ están definidos así:

$$|k\rangle = |\Omega \ m \ n_{\perp} \ n_z\rangle \text{ con } \Omega > 0 \ m \geq 0 \quad (\text{A.0.18})$$

$$|\overline{k}\rangle = |-\Omega \ -m \ n_{\perp} \ n_z\rangle \text{ con } \Omega > 0 \ m \geq 0 \quad (\text{A.0.19})$$

y verifican que:

$$\mathcal{T} |k\rangle = \sigma_k |\overline{k}\rangle \quad \mathcal{T} |\overline{k}\rangle = \sigma_{\overline{k}} |k\rangle \quad (\text{A.0.20})$$

$$\mathcal{S} |k\rangle = \sigma_k |\overline{k}\rangle \quad \mathcal{S} |\overline{k}\rangle = \sigma_{\overline{k}} |k\rangle \quad (\text{A.0.21})$$

Los operadores de creación y destrucción de partículas cumplen c_k^+ , $c_{\overline{k}}^+$, c_k y $c_{\overline{k}}$:

$$c_k^+ |-\rangle = |k\rangle \quad c_k |k\rangle = |-\rangle \quad (\text{A.0.22})$$

$$c_{\overline{k}}^+ |-\rangle = |\overline{k}\rangle \quad c_{\overline{k}} |\overline{k}\rangle = |-\rangle \quad (\text{A.0.23})$$

Ambos estados se transforman por medio de las relaciones anteriores cuando sobre ellos se aplica uno de los operadores de simetría. De hecho los operadores de creación y destrucción de partículas están definidos de manera que $\hat{c}_k^+ |-\rangle = |k\rangle$, etc. Estos operadores

cumplen:

$$[j_k, \widehat{c}_k^+] = \Omega \widehat{c}_k^+ \quad (\text{A.0.24})$$

$$[j_k, \widehat{c}_k^+] = -\Omega \widehat{c}_k^+ \quad (\text{A.0.25})$$

$$[j_k, \widehat{c}_k] = -\Omega \widehat{c}_k \quad (\text{A.0.26})$$

$$[j_k, \widehat{c}_k^-] = \Omega \widehat{c}_k^- \quad (\text{A.0.27})$$

Por tanto la expresión de la transformación de *Bogoliubov* que preserva la simetría axial será:

$$\widehat{\alpha}_a^+ = \sum_{\nu_k} U_{\nu_k \nu_a}^\Omega \widehat{c}_k^+ + V_{\bar{\nu}_k \nu_a}^\Omega \widehat{c}_k^- \quad (\text{A.0.28})$$

$$\widehat{\alpha}_a^+ = \sum_{\nu_k} U_{\nu_k \nu_a}^{\bar{\Omega}} \widehat{c}_k^+ - V_{\nu_k \bar{\nu}_a}^{\bar{\Omega}} \widehat{c}_k^- \quad (\text{A.0.29})$$

Si se impone que la función de onda *Hartree-Fock-Bogoliubov* preserve la invariancia temporal y la simetría de paridad, las matrices U y V serán reales y cumplirán:

$$U_{\bar{\nu}_k \bar{\nu}_a}^{\bar{\Omega}} = (-1)^{m_k} U_{\nu_k \nu_a}^\Omega \quad (\text{A.0.30})$$

$$V_{\nu_k \bar{\nu}_a}^{\bar{\Omega}} = (-1)^{m_k} V_{\nu_k \nu_a}^\Omega \quad (\text{A.0.31})$$

A.1. Matrices de contracción del Teorema de Wick Estadístico Extendido

Puesto que en la base axial las matrices U y V se reducen a la estructura en bloques, como se ha visto anteriormente, las formas de las matrices de densidad ρ y κ también adquieren una estructura similar en bloques. En concreto la forma de la matriz densidad en la aproximación EFA es:

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} \rho_{ij} & 0 \\ 0 & \rho_{\bar{i}\bar{j}} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.32})$$

$$\rho_{ij} = -v_{i\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta^\dagger}_{l\bar{k}}^T u_{kj}^\dagger + v_{i\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta^\dagger}_{lk}^T v_{k\bar{j}}^T + u_{il} \widehat{\beta^\dagger \beta^\dagger}_{lk}^T u_j^\dagger + u_{il} \widehat{\beta^\dagger \beta^\dagger}_{l\bar{k}}^T v_{k\bar{j}}^T \quad (\text{A.1.33})$$

$$\begin{aligned} \rho_{\bar{i}\bar{j}} &= (-1)^{m_i+m_k} \left[-v_{\bar{i}\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T u_{k\bar{j}}^\dagger + v_{\bar{i}\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T v_{k\bar{j}}^T + u_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T u_{k\bar{j}}^\dagger + u_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T v_{k\bar{j}}^T \right] = \quad (\text{A.1.34}) \\ &= (-1)^{m_i+m_k} \rho_{ij} \end{aligned}$$

donde

$$\rho_{ij} = \begin{pmatrix} \rho_{ij} & 0 \\ 0 & (-1)^{m_i+m_k} \rho_{ij} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.35})$$

Es importante notar en esta expresión la invariancia temporal que muestra ρ .

La estructura del tensor de apareamiento κ es:

$$\kappa_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa_{i\bar{j}} \\ \kappa_{\bar{i}j} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.36})$$

siendo

$$\kappa_{i\bar{j}} = -(-1)^{m_i} \left[v_{\bar{i}\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T v_{k\bar{j}}^\dagger + v_{\bar{i}\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T u_{k\bar{j}}^T - u_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T v_{k\bar{j}}^\dagger + u_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T u_{k\bar{j}}^T \right] \quad (\text{A.1.37})$$

$$\begin{aligned} \kappa_{\bar{i}j} &= (-1)^{m_k} \left[v_{\bar{i}\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T v_{k\bar{j}}^\dagger + v_{\bar{i}\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T u_{k\bar{j}}^T - u_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T v_{k\bar{j}}^\dagger + u_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T u_{k\bar{j}}^T \right] = \quad (\text{A.1.38}) \\ &= -(-1)^{m_i+m_k} \kappa_{i\bar{j}} \end{aligned}$$

$$\kappa_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & \kappa_{i\bar{j}} \\ -(-1)^{m_i+m_k} \kappa_{i\bar{j}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.39})$$

La última de las matrices densidad utilizadas es:

$$-\bar{\kappa}_{ij}^* = \begin{pmatrix} 0 & -\bar{\kappa}_{i\bar{j}}^* \\ -\bar{\kappa}_{\bar{i}j}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.40})$$

donde

$$-\bar{\kappa}_{i\bar{j}}^* = -(-1)^{m_k} \left[u_{i\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T u_{k\bar{j}}^\dagger + v_{\bar{i}\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T u_{k\bar{j}}^\dagger - u_{i\bar{l}}^* \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}k}^T v_{k\bar{j}}^T + v_{\bar{i}\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta}_{\bar{l}\bar{k}}^T v_{k\bar{j}}^T \right] \quad (\text{A.1.41})$$

$$-\bar{\kappa}_{ij}^* = (-1)^{m_i} \left[u_{il}^* \widehat{\beta^\dagger \beta^T}_{l\bar{k}} u_{kj}^\dagger + v_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta^T}_{lk} u_{kj}^\dagger - u_{il}^* \widehat{\beta \beta^\dagger}_{lk} v_{k\bar{j}}^T + v_{i\bar{l}} \widehat{\beta \beta^\dagger}_{l\bar{k}} v_{k\bar{j}}^T \right] \quad (\text{A.1.42})$$

$$= (-1)^{m_i+m_k} \bar{\kappa}_{i\bar{j}}^*$$

$$-\bar{\kappa}_{ij}^* = \begin{pmatrix} 0 & -\bar{\kappa}_{i\bar{j}}^* \\ (-1)^{m_i+m_k} \bar{\kappa}_{i\bar{j}}^* & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.43})$$

En la práctica se suele utilizar la matriz $\bar{\kappa}_{i\bar{j}}^*$:

$$\bar{\kappa}_{i\bar{j}}^* = -(-1)^{m_k} \left[-u_{il}^* \widehat{\beta^\dagger \beta^T}_{l\bar{k}} u_{kj}^\dagger - v_{i\bar{l}} \widehat{\beta^\dagger \beta^T}_{lk} u_{kj}^\dagger + u_{il}^* \widehat{\beta \beta^\dagger}_{lk} v_{k\bar{j}}^T - v_{i\bar{l}} \widehat{\beta \beta^\dagger}_{l\bar{k}} v_{k\bar{j}}^T \right] \quad (\text{A.1.44})$$

Para aplicar la proyección a buena paridad se aprovecha que en la base axial del oscilador armónico la paridad es una transformación de simetría. De modo que se aplica la proyección a la base de partículas y luego se realiza la transformación de Bogoliubov (U, V). Ésto daría el mismo resultado que si se hiciera la transformación de Bogoliubov para luego aplicar la proyección de paridad en la base de cuasipartículas a los estados de cuasipartículas.

A continuación se van a deducir las matrices A y B que se obtienen al estudiar la proyección a paridad. A partir de estas matrices A y B se podrán deducir las expresiones de las contracciones del teorema de Wick.

En la base del oscilador armónico axial, el operador paridad tiene los autovalores:

$$\widehat{\Pi} |\Omega \quad m \quad n_\perp \quad n_z\rangle = (-1)^{m+n_z} |\Omega \quad m \quad n_\perp \quad n_z\rangle \quad (\text{A.1.45})$$

Es decir que la matriz del operador paridad es:

$$R_{kl} = \delta_{kl} (-1)^{m+n_z} \quad (\text{A.1.46})$$

Por tanto las matrices U y V de la transformación de Bogoliubov de las cuasipartículas proyectadas son:

$$U_1 = RU_o \quad (\text{A.1.47})$$

$$V_1 = RV_o \quad (\text{A.1.48})$$

$$A = \begin{pmatrix} A_{ka} & 0 \\ 0 & A_{ka} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.49})$$

$$B = \begin{pmatrix} 0 & -B_{k\bar{a}} \\ B_{k\bar{a}} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.50})$$

Así,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ B & A^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* & 0 \\ B_{k\bar{a}} & 0 & 0 & A_{ka}^* \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} A & B^* \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{ka} & 0 & 0 & -B_{k\bar{a}}^* \\ 0 & A_{ka} & B_{k\bar{a}}^* & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.51})$$

Para dejar la expresión más compacta, se van a aplicar unas transformaciones.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ B & A^* \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* \end{pmatrix}; \quad \begin{pmatrix} A & B^* \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} A_{ka} & -B_{k\bar{a}}^* & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{ka} & B_{k\bar{a}}^* \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.52})$$

Por tanto $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ B & A^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B^* \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ahora tomará la forma:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{ka} & -B_{k\bar{a}}^* & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & A_{ka} & B_{k\bar{a}}^* \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.53})$$

$$\begin{pmatrix} 1 + pA_{ka} & -pB_{k\bar{a}}^* & 0 & 0 \\ B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* + p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 + pA_{ka} & pB_{k\bar{a}}^* \\ 0 & 0 & -B_{k\bar{a}} & A_{ka}^* + p \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.54})$$

Para calcular la matriz inversa de $\left[\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ B & A^* \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} p & 0 \\ 0 & p \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B^* \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right]$ sólo habrá que calcular la inversa de cada bloque.

A partir de ahora, se van a usar los valores concretos de p para cada estado. Sólo para los estados bloqueados $i = \mu$ y para sus reverso temporales $i = \bar{\mu}$, p es distinto de cero. Así, $p_i A_{ij} = A_{\mu j}$

$$\begin{bmatrix} 1 + A_{\mu j} & -B_{\mu j}^* \\ B & A^* + 1_{\mu\mu} \end{bmatrix} \text{ y } \begin{bmatrix} 1 + A_{\mu j} & B_{\mu j}^* \\ -B & A^* + 1_{\mu\mu} \end{bmatrix} \quad (\text{A.1.55})$$

Merece la pena detallar que:

$$\begin{pmatrix} 1 + A_{\mu j} & -B_{\mu j}^* \\ B & A^* + 1_{\mu\mu} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} \\ \tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.56})$$

y

$$\begin{pmatrix} 1 + A_{\mu j} & B_{\mu j}^* \\ -B & A^* + 1_{\mu\mu} \end{pmatrix}^{-1} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & -\tau_{12} \\ -\tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.57})$$

donde las matrices τ tienen la forma:

$$\tau_{11} = \mathbb{I} - \frac{1}{\mathcal{W}} \left[\left(1 + A_{\mu\mu}^{*-1} \right) A_{\mu j}^{\dagger^{-1}} + \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu\mu} \left(-A^{*-1} B \right)_{\mu j} \right] \quad (\text{A.1.58})$$

$$\tau_{12} = -\frac{1}{\mathcal{W}} \left[-\left(1 + A_{\mu\mu}^{*-1} \right) \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu j} + \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu\mu} A_{\mu j}^{*-1} \right] \quad (\text{A.1.59})$$

$$\begin{aligned} \tau_{21} = & -\left(A^{*-1} B \right)_{ij} + \frac{1}{\mathcal{W}} \left[\left(1 + A_{\mu\mu}^{*-1} \right) \left(A^{*-1} B \right)_{i\mu} A_{\mu j}^{\dagger^{-1}} - \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu\mu} \left(A^{*-1} B \right)_{i\mu} \left(A^{*-1} B \right)_{\mu j} - \right. \\ & \left. - \left(A^{*-1} B \right)_{\mu\mu} A_{i\mu}^{*-1} A_{\mu j}^{\dagger^{-1}} + \left(1 + A_{\mu\mu}^{\dagger^{-1}} \right) A_{i\mu}^{*-1} \left(A^{*-1} B \right)_{\mu j} \right] \quad (\text{A.1.60}) \end{aligned}$$

$$\tau_{22} = A_{ij}^{*-1} - \frac{1}{\mathcal{W}} \left[\left(1 + A_{\mu\mu}^{*-1} \right) \left(A^{*-1} B \right)_{i\mu} \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu j} - \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu\mu} \left(A^{*-1} B \right)_{i\mu} A_{\mu j}^{*-1} - \right. \quad (\text{A.1.61})$$

$$\left. - \left(A^{*-1} B \right)_{\mu\mu} A_{i\mu}^{*-1} \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu j} + \left(1 + A_{\mu\mu}^{\dagger^{-1}} \right) A_{i\mu}^{*-1} A_{\mu j}^{*-1} \right]$$

siendo

$$\mathcal{W} = \left(1 + A_{\mu\mu}^{\dagger^{-1}} \right) \left(1 + A_{\mu\mu}^{*-1} \right) - \left(A^{*-1} B \right)_{\mu\mu} \left(B^* A^{*-1} \right)_{\mu\mu} \quad (\text{A.1.62})$$

Continuando la derivación de la matriz de contracción, la expresión de $(\mathbb{I} + \mathcal{M})^{-1}$ se puede simplificar como:

$$\begin{aligned} (\mathbb{I} + \mathcal{M})^{-1} &= \begin{pmatrix} \tau_{11} & \tau_{12} & 0 & 0 \\ \tau_{21} & \tau_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{11} & -\tau_{12} \\ 0 & 0 & -\tau_{21} & \tau_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & p & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & p \end{pmatrix} = \quad (\text{A.1.63}) \\ &= \begin{pmatrix} \tau_{11} & (\tau_{12})_{\mu\mu} & 0 & 0 \\ \tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{11} & -(\tau_{12})_{\mu\mu} \\ 0 & 0 & -\tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Aplicando las mismas transformaciones que se aplicaron anteriormente a las otras matrices para compactar su expresión, la matriz de las contracción toma la siguiente estructura:

$$\left(\begin{array}{cc} \widehat{\beta_k \beta_l} & \widehat{\beta_k \beta_l^\dagger} \\ \widehat{\beta_k^\dagger \beta_l} & \widehat{\beta_k^\dagger \beta_l^\dagger} \end{array} \right) \rightarrow \begin{pmatrix} \beta_i \beta_j & \beta_i \beta_j^+ & \beta_i \beta_{\bar{j}} & \beta_i \beta_{\bar{j}}^+ \\ \beta_i^+ \beta_j & \beta_i^+ \beta_j^+ & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}} & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}}^+ \\ \beta_{\bar{i}} \beta_j & \beta_{\bar{i}} \beta_j^+ & \beta_{\bar{i}} \beta_{\bar{j}} & \beta_{\bar{i}} \beta_{\bar{j}}^+ \\ \beta_{\bar{i}}^+ \beta_j & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_j^+ & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_{\bar{j}} & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_{\bar{j}}^+ \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.64})$$

El conmutador de los operadores en la notación condensada cumple:

$$\{a_{\nu_1}, a_\nu\} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \{a_{\nu_1}, a_\nu\} \{a_{\nu_1}, a_\nu\} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.65})$$

Y multiplicando la matriz de las contracciones (A.1.64) por $\{a_{\nu_1}, a_\nu\}$, se obtiene:

$$\left(\begin{array}{cc} \widehat{\beta_k \beta_l} & \widehat{\beta_k \beta_l^\dagger} \\ \widehat{\beta_k^\dagger \beta_l} & \widehat{\beta_k^\dagger \beta_l^\dagger} \end{array} \right) \{a_{\nu_1}, a_\nu\} = \sum_{\nu_1} (\mathbb{I} + \mathcal{M})_{\mu\nu_1}^{-1} \quad (\text{A.1.66})$$

$$\{a_{\nu_1}, a_\nu\} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.67})$$

$$\begin{pmatrix} \beta_i \beta_j & \beta_i \beta_j^+ & \beta_i \beta_{\bar{j}} & \beta_i \beta_{\bar{j}}^+ \\ \beta_i^+ \beta_j & \beta_i^+ \beta_j^+ & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}} & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}}^+ \\ \beta_{\bar{i}} \beta_j & \beta_{\bar{i}} \beta_j^+ & \beta_{\bar{i}} \beta_{\bar{j}} & \beta_{\bar{i}} \beta_{\bar{j}}^+ \\ \beta_{\bar{i}}^+ \beta_j & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_j^+ & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_{\bar{j}} & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_{\bar{j}}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & (\tau_{12})_{\mu\mu} & 0 & 0 \\ \tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{11} & -(\tau_{12})_{\mu\mu} \\ 0 & 0 & -\tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.68})$$

$$\begin{pmatrix} \beta_i \beta_j^+ & \beta_i \beta_{\bar{j}} & \beta_i \beta_{\bar{j}}^+ & \beta_i \beta_j \\ \beta_i^+ \beta_j^+ & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}} & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}}^+ & \beta_i^+ \beta_j \\ \beta_{\bar{i}} \beta_j^+ & \beta_{\bar{i}} \beta_{\bar{j}} & \beta_{\bar{i}} \beta_{\bar{j}}^+ & \beta_{\bar{i}} \beta_j \\ \beta_{\bar{i}}^+ \beta_j^+ & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_{\bar{j}} & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_{\bar{j}}^+ & \beta_{\bar{i}}^+ \beta_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & (\tau_{12})_{\mu\mu} & 0 & 0 \\ \tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \tau_{11} & -(\tau_{12})_{\mu\mu} \\ 0 & 0 & -\tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.69})$$

La expresión final de las contracción que se busca es:

$$\begin{pmatrix} \beta_i \beta_j^+ & \beta_i \beta_{\bar{j}} \\ \beta_i^+ \beta_j^+ & \beta_i^+ \beta_{\bar{j}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tau_{11} & (\tau_{12})_{\mu\mu} \\ -\tau_{21} & (\tau_{22})_{\mu\mu} \end{pmatrix} \quad (\text{A.1.70})$$

donde τ_{11} , τ_{12} , τ_{21} y τ_{22} tienen las expresiones (A.1.58), (A.1.59), (A.1.60) y (A.1.61) respectivamente.

Bibliografía

- [1] H.J. Mang. *Physics Reports* 18 (1975) 325
- [2] J. Dechargè and D. Gogny. *Physical Review C* 21 (1980) 1568
- [3] M. Girod and B. Grammaticos *Physical Review C* 27 (1983) 2317

- [4] E. Garrote, J.L. Egido, and L.M. Robledo *Physical Review Letters* 80 (1998) 4398
- [5] E.Garrote, J.L. Egido, and L.M. Robledo *Nucl. Phys.* **A654** (1999) 723c

- [6] M. Bender, P-H. Heenen and P.G. Reinhard. *Rev. Mod. Phy* 75 (2003) 121
- [7] J.L. Egido and L.M. Robledo *Physical Review Letters* 85 (2000) 1198

- [8] J.P. Blaizot and G. Ripka. *Quantum Theory of Finite Systems*. (1986) MIT Press. Cambridge.
- [9] J.M. Arias and M. Lozano. *An advanced course in Modern Nuclear Physics*. (2001) Springer-Verlag Berlin.
- [10] A. Bohr B.R. Mottelson: *Nuclear structure*. (1969). W.A. Benjamin Inc., New York

- [11] S. Bjornholm and J.E. Lynn, *Rev. of Mod. Phys.* **52** (1980) 725
- [12] H. Flocard, P.H. Heenen, S.J. Krieger and M.S. Weiss, *Prog. Theor. Phys.* 72 (1984) 1000.
- [13] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J.A. Maruhn and W. Greiner *Phys. Rev.* **C58** (1998) 2126
- [14] T. Buervenich, M. Bender, J.A. Maruhn and P.-G. Reinhard, *Phys. Rev.* **C69** (2004) 014307
- [15] J. F. Berger, M. Girod and D. Gogny, *Nucl. Phys.* **A428** (1984) 23c.
- [16] J. F. Berger, M. Girod and D. Gogny, *Nucl. Phys.* **A502** (1989) 85c.
- [17] J.F. Berger and K. Pomorski, *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000) 30

-
- [18] J.L. Egido and L.M. Robledo, Phys. Rev. Lett. **85** (2000) 1198.
- [19] J.L. Egido and L.M. Robledo, Nucl. Phys. **A494** (1989) 85
- [20] M. Warda, J.L. Egido, L.M. Robledo and K. Pomorski Phys. Rev. **C66** (2002)
- [21] J. Dechargé and D. Gogny, Phys. Rev. **C21** (1980) 1568.
- [22] P. Ring and P. Shuck, *The Nuclear Many Body Problem* (1980), Springer-Verlag. Berlin.
- [23] J.F. Berger, M. Girod and D. Gogny, Comp. Phys. Comm. **63** (1991) 365.
- [24] P. Fong, Phys. Rev. **122** (1961) 1545.
- [25] H. R. von Gunten, A. Grütter, H. W. Reist, and M. Baggenstos, Phys. Rev. C **23** (1981) 1110.
- [26] M. Anguiano, J.L. Egido and L.M. Robledo Nucl. Phys. **A683** (2001) 227
- [27] K. Rutz, J. A. Maruhn, P.-G. Reinhard, W. Greiner, Nucl.Phys. **A590** (1995) 680-702
- [28] P.A. Butler and W. Nazarewicz, Rev. of Mod. Phys. **68** (1996) 349
- [29] J. -F. Berger, L. Bitaud, J. Dechargé, M. Girod and K. Dietrich. Nucl.Phys. **A685** (2001)1c-16c
- [30] M. Sewtz, H. Backe *et al.* Phys. Rev. Lett. **90** (2003) 163002.
- [31] Zhongzhou Ren, Ding-Han Chen, Fei Tai, H. Y. Zhang, and W. Q. Shen. Phys. Rev. C **67** (2003) 064302.
- [32] Hongfei Zhang, Junqing Li *et al.* Phys. Rev. C **71** (2005) 054312.
- [33] S. Cwiok, W. Nazarewicz, and P.H. Heenen, Phys. Rev. Lett. **83**, 1108 (1999).
- [34] S. Cwiok, P.H. Heenen, W. Nazarewicz, Nature Vol. **433**, 705 (2005)
- [35] S. Cwiok, J. Dobaczewskic, P. -H. Heenen, P. Magierski and W. Nazarewicz, Nucl. Phys. **A611**, 211 (1996)
- [36] C. R. Chinn, J.-F. Berger, D. Gogny, M. S. Weiss Phys. Rev. C **45** (1992) 1700
- [37] J. Des Cloizeaux. *Approximation de Hartree-Fock et Approximation de Phase Aléatoire à Température Finie*. Many body physics (Ecole d'Eté de Physique Théorique, les Houches) edited by C. de Witt and R. Balian (Gordon & Breach, New York, 1967)
- [38] M. Bender, K. Rutz, P.-G. Reinhard, J. A. Maruhn Eur. Phys. J. **A7** (2000) 467-478.
- [39] A.L. Goodman. Nucl. Phy. **A352** (1981) 30
- [40] J.L. Egido and L.M. Robledo, Nucl. Phy. **A524** (1991) 65
- [41] J.G. Valatin Phys. Rev. **122**, (1961) 1012
- [42] J.C. Slater Phys. Rev. **81**, (1951) 385

-
- [43] A. Bohr, B.R. Mottelson and D. Pines. Phys. Rev. 110, (1958) 936
- [44] T.S. Sandhu and M.L. Rustig Phys. Rev. C 12 (1975) 666
- [45] C. Titin-Schnaider and Ph. Quentin Physics letters 49B (1974) 397
- [46] D.J. Thouless Nucl. Phys. 21 (1960) 225
- [47] P.Fong Phys. Rev. 122 (1961) 1545
- [48] E. Ruchowska et al. Phys. Rev. C 73 (2006) 044326
- [49] L. Bonneau, P. Quentin and D. Samsøen, Eur. Phys. J. A21, 391-406 (2004).
- [50] R. Vandenbosch and John R. Huizenga. *Nuclear Fission*. 1973. Academic Press
- [51] R. Rossignoli and P. Ring. Annals of Physics 235 (1994) 359
- [52] R. Balian and M. Vénéroni. Annals of Physics 164 (1985) 334
- [53] R. Balian and E. Brezin. Il nouvo cimento. LXIV B (1969) 37
- [54] P.G. Thirolf and D. Habs. Progresss in Particl and Nuclear Physics 49 (2002) 325
- [55] <http://ie.lbl.gov/ensdf/>
- [56] D. Gogny. *Nuclear Self-Consistent Field*. 1975 Editado por G. Ripka y M. Porneuf. orth-Holland/American Elsevier.
- [57] M. Gaudin, Nucl. Phys. 15 (1960) 89-91
- [58] R. Balian, H. Flocard and M. Vénéroni. Physics Reposts 317 (1999) 251-358
- [59] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky, and W. T. Vetterling, *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge Univ. Press, 1987.

Índice de figuras

7.1. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra a nivel de campo medio EFA (líneas continuas), junto con los resultados proyectados a paridad de número impar (líneas discontinuas).	90
7.2. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra a nivel de campo medio EFA, junto con los resultados tras la proyección a paridad de número par.	92
7.3. En el panel inferior se muestran las superficies de energía potencial para los resultados EFA y los proyectados a paridad de número impar para la configuración de mínima energía $j_z = 1/2$ en el núcleo ^{235}U . En el panel superior se muestran las diferencias entre ambas descripciones.	92
7.4. Esquema de niveles de partículas indicando los orbitales que favorecen la deformación octupolar ($\Delta l = 3$, $\Delta j = 3$ y $\Pi_i \Pi_j = -1$). Se indican también los números de partículas típicos para los que uno de los orbitales está completamente lleno y el otro completamente vacío. Para esos valores de N y Z es donde es más favorable la aparición de deformación octupolar estable.	93
7.5. Comparación de los dos métodos de reajuste del número de partículas tras la proyección. En línea continua gruesa están representados los resultados de EFA. En línea fina continua se representan los resultados proyectados con método de reajuste 1 y en línea discontinua los del método 2. Todos los resultados proyectados corresponden a la proyección a paridad positiva.	96
7.6. Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad positiva cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad positiva en el isótopo ^{229}Ra	97
7.7. Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad positiva cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad negativa para el isótopo ^{229}Ra	98
7.8. Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad negativa cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad positiva para el isótopo ^{229}Ra	99
7.9. Resultados de las energías EFA y proyectadas a paridad negativa cuando el estado de cuasipartícula bloqueado es de paridad negativa para el isótopo ^{229}Ra	100

- 7.10. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.11. 101
- 7.11. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.10. 102
- 7.12. Espectros del núcleo ^{229}Ra . A la izquierda se muestra el espectro teórico HFB-EFA y a la derecha el espectro tras la proyección. De este isótopo sólo se conoce su estado fundamental $\frac{5}{2}^+$ 102
- 7.13. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.14. 103
- 7.14. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.13. 103
- 7.15. Espectros del núcleo ^{231}Ra . A la izquierda se muestra el espectro teórico HFB-EFA, en el centro está el espectro tras la proyección y a la derecha se muestra el obtenido experimentalmente. 104
- 7.16. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.17. 104
- 7.17. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.16. 105
- 7.18. Espectros del núcleo ^{225}Ra . Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente. 105
- 7.19. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.20. 106

7.20. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.19. 107

7.21. Espectro de niveles del núcleo ^{227}Ra . Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente. 107

7.22. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.23. 108

7.23. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Ra incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.22. 108

7.24. Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{221}Ra 109

7.25. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Ra bloqueando los dos primeros estados de cada j_z . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver las figuras 7.26 y 7.27. 109

7.26. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Ra bloqueando el primer estado de cada j_z incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.25. 110

7.27. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Ra bloqueando el segundo estado de cada j_z incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.25. 110

7.28. Espectro del núcleo ^{223}Ra . A la izquierda se muestra el espectro teórico HFB-EFA, en el centro está el espectro tras la proyección y a la derecha el obtenido experimentalmente. 111

7.29. Comportamientos del momento dipolar en función del momento octupolar para los isótopos ^{223}Ra , ^{225}Ra y ^{231}Ra 112

7.30. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.31. 114

- 7.31. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{231}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.30. 115
- 7.32. Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{231}Th 115
- 7.33. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.34. 116
- 7.34. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{229}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.33. 116
- 7.35. Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{229}Th 117
- 7.36. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.37. 118
- 7.37. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{227}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.36. 118
- 7.38. Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{227}Th 119
- 7.39. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Th . Los resultados EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.40. 119
- 7.40. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{221}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.39. 120
- 7.41. Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{221}Th 120

7.42. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Th . Los resultados de EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.43. 121

7.43. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{225}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.42. 122

7.44. Se muestra el espectro teórico tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{225}Th . El estado fundamental experimental es $\frac{3}{2}^+$ 122

7.45. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Th . Los resultados de EFA se muestran con líneas continuas gruesas y las energías proyectadas con líneas discontinuas. Todos los resultados de energías proyectadas corresponden a la paridad positiva. Para ver el comportamiento de la energía proyectada a paridad negativa ver la figura 7.46. 123

7.46. Superficies de energía potencial para el núcleo ^{223}Th incluyendo las proyecciones a paridad positiva y negativa. Las curvas correspondientes a paridad positiva son las mismas que en la figura 7.45. 123

7.47. Se muestra el espectro teórico resultante aplicando la EFA, el espectro tras la proyección y el obtenido experimentalmente para el núcleo ^{223}Th 124

7.48. En esta figura se muestran los comportamientos del momento dipolar eléctrico en función del momento octupolar. Se han incluido los resultados para el ^{221}Th , ^{227}Th y ^{231}Th 125

7.49. Densidad nuclear aproximada para grandes deformaciones. 127

7.50. Energía total (izquierda) y de apareamiento (derecha) obtenidos partiendo de los niveles de cuasipartículas de los dos núcleos pares vecinos del ^{235}U (^{234}U y ^{236}U) 128

7.51. En la gráfica inferior están representadas las energías HFB como función del momento cuadrupolar Q_{20} . Se muestran los resultados de los cálculos promedio del ^{235}U (curva inferior) y los resultados del ^{234}U (curva superior). La línea discontinua corresponde a la energía ^{234}U desplazada hacia abajo para hacerla coincidir con la del ^{235}U . En la gráfica superior está representada la energía de apareamiento partícula-partícula como función del momento cuadrupolar. 130

7.52. Energías EFA-HFB para el núcleo ^{235}U correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de neutrones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua. 131

- 7.53. De las gráficas superiores la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica en el marco de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}U y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene al tener en cuenta la corrección rotacional. Todos los niveles de esta gráfica tienen básicamente la misma deformación cuadrupolar $Q_2 \approx 14$ b. En la parte inferior están las gráficas del espectro teórico correspondiente al isómero de fisión con y sin corrección rotacional. 132
- 7.54. Energías EFA-HFB para el núcleo ^{235}Np correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de protones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua. 133
- 7.55. De las gráficas superiores la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}Np y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene tras tener en cuenta la corrección rotacional. En la parte inferior está el espectro resultante al proyectar los estados a buena paridad y los espectros teóricos correspondientes al isómero de fisión con y sin corrección rotacional. . . 134
- 7.56. Energías EFA-HFB para el núcleo ^{235}Pa correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de protones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua. 135
- 7.57. De las gráficas superiores, la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}Pa y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene al tener en cuenta la corrección rotacional. En la parte inferior están los espectros teóricos del isómero de fisión con y sin corrección rotacional. . . . 136
- 7.58. Energías EFA-HFB para el núcleo ^{237}Am correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de protones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado para el cálculo promedio con línea discontinua. 137
- 7.59. De las gráficas superiores la de la izquierda muestra la predicción teórica de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{235}Am . Puesto que algunos de esos estados tienen la paridad rota, se han proyectado dichos estados a buena paridad y se ha encontrado el espectro que aparece en el centro. A la derecha se muestra el espectro que tiene en cuenta la corrección rotacional. Todos los niveles de esta gráfica tienen básicamente la misma deformación cuadrupolar $Q_2 \approx 14$ b. En la parte inferior están los espectros teóricos del isómero de fisión con y sin corrección rotacional. Experimentalmente se obtiene un estado fundamental $\frac{5}{2}^-$. 138

7.60. Energías EFA-HFB para el núcleo ^{237}Pu correspondientes al bloqueo de las configuraciones de cuasipartículas de neutrones más bajas con valores de j_z desde $1/2$ hasta $11/2$ (curvas continuas con símbolos). Adicionalmente, se añade el resultado del cálculo promedio con línea discontinua. 139

7.61. De las gráficas superiores la de la izquierda muestra el espectro experimental, el espectro central corresponde a la predicción teórica de la EFA-HFB para los niveles de energía más bajos del ^{237}Pu y la de la derecha muestra el espectro que se obtiene al tener en cuenta la corrección rotacional. En la parte inferior izquierda está el espectro del estado fundamental obtenido tras restaurar la paridad de los estados y a su derecha se encuentran los espectros teóricos del isómero de fisión con y sin corrección rotacional. 139

7.62. Se muestran los comportamientos de las deformaciones octupolares de las barreras de fisión en función del momento cuadrupolar. Se observa un patrón idéntico en todos los núcleos. 142

7.63. Representación aproximada de la densidad nuclear junto antes y después de la escisión 143

7.64. Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 1/2$ para el núcleo ^{235}U . En la parte inferior aparece la energía promedio (AVE) y EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules). 144

7.65. Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 5/2$ para el núcleo ^{235}Np . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules). 146

7.66. Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 3/2$ para el núcleo ^{235}Pa . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules). 147

- 7.67. Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 5/2$ para el núcleo ^{237}Am . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules). 148
- 7.68. Se muestran los resultados correspondientes a la configuración que da la mínima energía, $j_z = 1/2$ para el núcleo ^{237}Pu . En la parte inferior se muestra la energía total EFA. En la gráfica central está la energía de apareamiento EFA de protones y neutrones (línea negra) y la curva de los cálculos promedio (línea roja). En el panel superior se muestra la masa colectiva cuadrupolar deducida con EFA (líneas continuas con símbolos) y los resultados de los cálculos promedio (líneas discontinuas azules). 149
- 7.69. Energía de apareamiento y masas colectivas del ^{235}U para explicar el aumento en la semivida de la fisión espontánea en los núcleos impares. 152
- 7.70. PES del ^{234}U en rojo, juntos con los resultados EFA de la configuración de menor energía del ^{235}U , en negro y ^{235}Np , en azul. 152
- 7.71. Espectro del estado fundamental del ^{213}Bi . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. Experimentalmente [55] se sabe que el estado fundamental es $\frac{9}{2}^-$ igual que lo predicho por EFA. 155
- 7.72. Espectro del estado fundamental del ^{217}At . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. 156
- 7.73. Superficies de energía potencia para el ^{221}Fr . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a buen paridad tanto positiva como negativa. 157
- 7.74. Espectro del estado fundamental del ^{221}Fr . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{220}Rn . A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. Experimentalmente el estado fundamental es $\frac{5}{2}^-$ 157
- 7.75. Superficies de energía potencia para el ^{225}Ac . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a paridad positiva. 158
- 7.76. Espectro del estado fundamental del ^{225}Ac . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{224}Ra . En el centro está el espectro de los niveles proyectados y a la derecha el espectro experimental. 158

7.77. Superficies de energía potencia para el ^{229}Pa . Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a paridad positiva. 159

7.78. Espectro del estado fundamental del ^{229}Pa . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{228}Th . En el centro está el espectro de los niveles proyectados y a la derecha el espectro experimental. 160

7.79. Superficies de energía potencia para el ^{233}Np Se muestran las energías obtenidas de EFA, y las proyectadas a paridad positiva. 160

7.80. Espectro del estado fundamental del ^{233}Np . A la izquierda se muestra el espectro obtenido con la EFA partiendo del esquema de niveles del ^{232}U . A la derecha está el espectro de los niveles proyectados. Experimentalmente se encuentra como estado fundamental un doblete $\frac{5}{2}^+$, $\frac{5}{2}^-$ 161

7.81. Espectro del estado fundamental del ^{237}Am . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. El estado fundamental experimental es $\frac{5}{2}^-$ 161

7.82. Espectro del estado fundamental del ^{241}Bk . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. Según los datos experimentales el estado fundamental es $\frac{7}{2}^+$ y a 51 keV aparece un estado $\frac{3}{2}^-$ 162

7.83. Espectro del estado fundamental del ^{245}Es . A la izquierda se muestran los espectros obtenidos con la EFA partiendo del esquema de estados de cuasipartícula de los dos núcleos pares vecinos. A la izquierda está el espectro de los niveles proyectados. El estado fundamental experimental es $\frac{3}{2}^-$ 162

Índice de cuadros

7.1. Comparación de las energías HFB-EFA y proyectadas a paridad de número impar para la configuración de menor energía $j_z = 5/2$ en el núcleo ^{221}Ra . En la columna de la izquierda se muestran las energías HFB-EFA, en la columna central están las energía proyectadas, y en la columna de la derecha se registran los valores de los momentos octupolares.	91
7.2. Resultados del momento dipolar para todos los isótopos de Radio estudiados. En la segunda fila de cada cuadro están los resultados del espín, paridad y momento dipolar para el estado fundamental; en las filas siguientes aparecen los resultados de los tres primeros estados excitados.	113
7.3. Resultados del momento dipolar para todos los isótopos de Torio estudiados. En la segunda fila de cada cuadro están los resultados de espín, paridad y momento dipolar para el estado fundamental; en las filas siguientes aparecen los resultados de los tres primeros estados excitados.	125
7.4. Características del estado fundamental de los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la configuración de mínima energía, a continuación está la deformación cuadrupolar, las energías EFA y en la última columna se registran las energías EFA con la corrección rotacional.	131
7.5. Características del punto de ensilladura de la barrera de fisión de los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la configuración de mínima energía, en la tercera la deformación cuadrupolar, en la siguiente las energías EFA y en la última las energías EFA con la corrección rotacional.	140
7.6. Características del punto de ensilladura en la barrera de fisión de los núcleos estudiados. El subíndice AVE denota los resultados de los cálculos promedio. En la segunda columna se muestran las energías EFA, en la tercera las energías EFA con la corrección rotacional y en la última las alturas de las barreras.	140
7.7. Características del isómero de fisión en los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la configuración de mínima energía, en la tercera la deformación cuadrupolar, en la cuarta se registran las energías EFA y en la última las energías EFA con la corrección rotacional.	141

- 7.8. Energías de excitación de los isómeros de fisión. En la segunda columna se muestra las energías de excitación EFA, en la tercera las mismas energías con la corrección rotacional y en la cuarta los datos experimentales. 141
- 7.9. Características del punto de escisión de la fisión de los núcleos estudiados. En la segunda columna se muestra la deformación cuadrupolar, en la tercera columna están el espín de la configuración de energía mínima. A continuación se registran las energías EFA en el punto de escisión para la configuración de un fragmento y en la última columna están las energías EFA para la solución con dos fragmentos. 143
- 7.10. Características del punto de escisión de la fisión de los núcleos estudiados incluyendo la corrección rotacional. En la segunda columna se muestra la deformación cuadrupolar, en la tercera columna está el espín de la configuración de energía mínima. A continuación se registran las energías EFA en el punto de escisión para la configuración de un fragmento y en la última columna están las energías EFA para la solución con dos fragmentos. 145
- 7.11. Valores de las semividas de fisión espontánea evaluadas tomando el método 1. En la segunda columna se muestran los datos correspondientes a los resultados sin corrección rotacional, mientras que en la tercera columna aparecen los resultados cuando se tiene en cuenta la corrección rotacional. En la cuarta columna están los resultados experimentales. 151
- 7.12. Valores de las semividas de fisión espontánea evaluadas tomando el método 2. En la segunda columna se muestran los datos correspondientes a los resultados sin corrección rotacional, mientras que en la tercera columna aparecen los resultados cuando se tiene en cuenta la corrección rotacional. En la cuarta columna están los resultados experimentales. 151
- 7.13. Valores de las semividas de fisión espontánea evaluadas con los resultados promedio. Dicho resultados se encuentran con las ecuación HFB para núcleos pares construyendo el valor medio de las partículas a un número impar. En la segunda columna se muestran los datos correspondientes a los resultados sin corrección rotacional, mientras que en la tercera columna aparecen los resultados cuando se tiene en cuenta la corrección rotacional. 153
- 7.14. Valores de Q_α para la cadena de desintegración α . En la segunda columna están los datos experimentales y en las siguientes aparecen los resultados obtenidos por EFA y tras la proyección respectivamente. 164