

# Estudio de las fluctuaciones de apareamiento en núcleos atómicos con teorías más allá del campo medio

*Memoria de tesis presentada para optar al grado de Doctor:*

Nuria López Vaquero

*Dirigida por:*

Prof. D. José Luis Egido de los Ríos



*A mis padres,  
a Marta y a Gus.*



# Índice general

<b>Resumen</b>	<b>9</b>
<b>Abstract</b>	<b>11</b>
<b>1. Introducción</b>	<b>13</b>
<b>2. Modelos de estructura nuclear</b>	<b>19</b>
2.1. Introducción . . . . .	19
2.2. Modelo de capas . . . . .	21
2.3. Métodos de campo medio autoconsistente . . . . .	22
2.3.1. Interacción de Gogny . . . . .	24
2.4. Modelos colectivos nucleares . . . . .	25
2.5. Modelos algebraicos . . . . .	27
<b>3. Método de HFB y teorías más allá del campo medio</b>	<b>29</b>
3.1. Introducción . . . . .	29
3.2. Ecuaciones de HFB . . . . .	30
3.3. Ruptura de las simetrías. . . . .	37
3.4. Restauración de simetrías. Métodos de Proyección . . . . .	39
3.4.1. Proyección a buen número de partículas . . . . .	41
3.4.2. Proyección a buen momento angular . . . . .	45
3.4.3. Divergencias y término dependiente de la densidad . . . . .	48
3.4.4. Proyección simultánea a $N$ y $J$ . . . . .	52
3.5. Método de la coordenada generadora . . . . .	53
<b>4. Estudio de las fluctuaciones de apareamiento en el <math>^{52}\text{Ti}</math></b>	<b>59</b>
4.1. Introducción . . . . .	59
4.2. Superficies de energía potencial como función de la deformación	60
4.3. Una nueva coordenada: $\delta$ . . . . .	62
4.4. PES 2D en diferentes aproximaciones para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	66
4.5. Cálculos GCM . . . . .	69

4.5.1.	Tamaño de la base para la coordenada $\delta$ . . . . .	69
4.5.2.	Convergencia para la energía . . . . .	71
4.5.3.	Espectros para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	73
4.5.4.	Ligaduras en $\delta_Z$ , $\delta_N$ y $\delta$ . . . . .	78
<b>5.</b>	<b>Estudio de la aproximación HFB+AMP</b>	<b>81</b>
5.1.	Elementos de matriz de la norma. . . . .	81
5.2.	Distribución del número de partículas . . . . .	87
<b>6.</b>	<b>Superficies de energía potencial y espectros con <math>q</math> y <math>\delta</math></b>	<b>91</b>
6.1.	Introducción . . . . .	91
6.2.	Superficies de energía potencial 1D . . . . .	91
6.3.	PES 2D . . . . .	94
6.3.1.	PES con proyección a diferente momento angular . . . . .	94
6.3.2.	PES para núcleos con diferente grado de colectividad . . . . .	98
6.4.	Espectros . . . . .	100
6.4.1.	Espectros para el $^{54}\text{Cr}$ . . . . .	101
6.4.2.	Espectros para los Magnesios . . . . .	105
6.4.3.	Espectros para los Calcios . . . . .	107
6.5.	Resumen . . . . .	109
<b>7.</b>	<b>Resultados de observables nucleares como función de <math>q</math> y <math>\delta</math></b>	<b>111</b>
7.1.	Energías de separación . . . . .	111
7.2.	Probabilidades de transición . . . . .	113
7.3.	Energía de excitación para los Calcios . . . . .	115
7.4.	Transiciones eléctricas monopolares. . . . .	117
<b>8.</b>	<b>Vibraciones colectivas</b>	<b>123</b>
8.1.	Vibraciones cuadrupolares. Caso autoconsistente . . . . .	124
8.2.	Vibraciones simuladas en dos dimensiones . . . . .	126
8.2.1.	Vibraciones cuadrupolares . . . . .	126
8.2.2.	Vibraciones de apareamiento . . . . .	129
8.3.	Funciones de onda 2D reales, con acoplo en $q$ y $\delta$ . . . . .	131
8.4.	Funciones de onda en 2D para diferentes aproximaciones . . . . .	136
<b>9.</b>	<b>Desintegración doble beta sin emisión de neutrinos</b>	<b>139</b>
9.1.	Introducción . . . . .	139
9.2.	Marco Teórico . . . . .	142
9.3.	Un ejemplo: La desintegración $^{136}\text{Xe}$ . . . . .	145
9.4.	Resultados para una desintegración $0\nu\beta\beta$ . . . . .	149
9.5.	Resumen . . . . .	155

10. Conclusiones y perspectivas	157
A. Acrónimos	161
B. Teorema de Wick y contracción de operadores	163
C. Expresiones de la energía proyectada	167
D. Cálculos con funciones de onda proyectadas	171
E. Elementos de matriz nuclear en una desintegración $0\nu\beta\beta$	177
Índice de figuras	181
Índice de tablas	183
Bibliografía	185
Agradecimientos	195





# Resumen

La aproximación de campo medio autoconsistente con interacciones efectivas fenomenológicas ha sido muy exitosa para describir la mayoría de las características nucleares a lo largo de toda la carta de núcleos. Este éxito está estrechamente relacionado con la ruptura espontánea de las simetrías, que permite describir el sistema de muchos cuerpos con una sola función de onda intrínseca simple de tipo producto que incorpora correlaciones asociadas a la deformación y al apareamiento. No obstante, para hacer estudios espectroscópicos y/o describir sistemas con coexistencia de forma, se han de aplicar teorías que vayan más allá de la aproximación de campo medio.

En este trabajo, se van a mostrar resultados obtenidos con la interacción de Gogny aplicando métodos más allá del campo medio que incluyen la restauración de la simetría del número de partículas y de invariancia rotacional con métodos de proyección, además de mezcla de configuraciones llevada a cabo mediante el método de la coordenada generadora. Se va a incidir en la relevancia de la proyección al número de partículas con el método de la variación después de la proyección y en papel que juega la autoconsistencia para determinar los estados de la base.

En particular, estos métodos han sido utilizados para estudiar, por primera vez, de manera simultánea la deformación cuadrupolar y las fluctuaciones de apareamiento. Se investigará de manera minuciosa la influencia de las fluctuaciones de apareamiento de gran amplitud en el marco teórico que ha sido descrito más arriba.

Se va a estudiar el efecto de los grados de libertad mencionados en la estructura nuclear. Para ello, se van a analizar las energías de excitación, así como otros observables relevantes: las probabilidades de transición  $E0$  y  $E2$ , o las energías de separación. Estos estudios se han hecho para una selección de núcleos: esféricos, deformados y con diferente grado de colectividad. Encontramos que los efectos de las fluctuaciones de apareamiento aumentan con la energía de excitación y a mayor momento angular.

Además, se van a estudiar en detalle las vibraciones de apareamiento y su relación con el grado de libertad cuadrupolar, obteniéndose que la defor-

ción inhibe fuertemente dichas vibraciones.

Para terminar, se van a investigar los elementos de matriz nuclear del proceso de desintegración doble beta sin emisión de neutrinos para los núcleos donde la detección de dicho proceso -que implica física más allá del modelo estándar- es más plausible. Se va a evaluar el papel que juegan la deformación y el apareamiento en dichos elementos de matriz. Encontramos un importante aumento del valor de los elementos de matriz con respecto a los que se obtienen cuando no se incluyen las fluctuaciones de apareamiento, lo que implica una reducción de las vidas medias de dichos isótopos.

# Abstract

Self-consistent mean field approaches with effective phenomenological interactions have succeed in describing many bulk properties along the whole nuclear chart. This success is closely related to the spontaneous symmetry breaking mechanism that allows the inclusion of many correlations within a very simple intrinsic product wave function. However, in some cases this picture fails in taking into account important correlations and methods beyond the mean field approach have to be applied.

In this work I will show some recent results obtained with the Gogny interaction applying methods beyond mean field that include particle number and rotational symmetry restoration, plus configuration mixing within generating coordinate method framework. Hence, the relevance of the particle number projection before the variation method and the self-consistency in determining the basis states will be analyzed.

In particular, these methods are applied for the first time to study the quadrupole deformation and pairing fluctuations on the same footing. Especially, the influence of large amplitude pairing fluctuations is thoroughly investigated in the framework depicted above.

I will discuss the influence of both degrees of freedom on the resulting nuclear structure, analyzing the spectroscopic properties. Relevant observables like excitation energies,  $E0$  and  $E2$  transition probabilities, or separation energies are also studied.

These studies have been performed for a selection of nuclei: spherical, deformed and with different degrees of collectivity. As a result, an increase of the effect of the pairing fluctuations with increasing the excitation energy and angular momentum is found.

I will also deal the topic about pairing vibrations. They are studied in detail with the conclusion that deformations strongly inhibits their existence.

To close, we present an study of the nuclear matrix elements for the neutrinoless double-beta decay calculated for the most promising candidates to detect this process beyond the standard model. In particular, the role of the deformation and pairing on such nuclear matrix elements are analyzed. An

important increase in the value with respect to the ones found without the inclusion of pairing fluctuations is obtained, reducing the predicted half-lives of these isotopes.

# Capítulo 1

## Introducción

La física nuclear se establece como rama de conocimiento de interés a finales del siglo XIX con el descubrimiento de la radiactividad en 1896 por H. Becquerel, punto de partida para los trabajos en este campo del matrimonio Curie que culmina en 1898 con el descubrimiento de dos elementos radiactivos existentes en la naturaleza, el  $^{84}\text{Po}$  y el  $^{88}\text{Ra}$ . Ernest Rutherford clasifica las radiaciones en alfa, beta y gamma y propone en 1911 su modelo atómico en el que se establece la existencia del núcleo atómico por primera vez. Este modelo sería pronto sustituido, en 1913, por el de Niels Bohr, capaz de explicar los espectros de emisión característicos de los átomos. El descubrimiento del neutrón en 1932 por James Chadwick y el desarrollo de la física cuántica en la primera mitad del siglo pasado nos conducen al modelo de núcleo atómico que conocemos hoy en día [1].

El conocimiento de la física nuclear se hace necesario por la cantidad de campos de interés en los que está presente. Ha permitido desarrollar tecnologías de aplicación en la medicina, como las resonancias magnéticas nucleares (RMN), la tomografía axial computerizada (TAC) o la tomografía computerizada por emisión de positrones (PET). Íntimamente ligado a su nombre está la fisión y fusión nuclear y la obtención de energía por medio de estos procesos como parte de la solución al problema energético. La astrofísica es otro de los campos donde la física nuclear juega un papel clave. Así, la materia que conforma el universo se forma por medio de reacciones nucleares que suceden en entornos astrofísicos, desde los procesos de fusión que tienen lugar dentro de las estrellas hasta las capturas rápidas de neutrones que se producen en explosiones de supernova y colisiones de estrellas de neutrones. Por tanto, el conocimiento preciso de dichas reacciones nucleares es esencial para entender el origen y abundancia de los elementos químicos.

Durante los últimos veinte años la imagen y concepción del núcleo atómi-

co ha cambiado debido al renacimiento que ha experimentado la estructura nuclear como consecuencia del desarrollo de nuevas técnicas experimentales como los haces de iones radiactivos y los espectrómetros de rayos  $\gamma$  en  $4\pi$  de alta eficiencia [2]. Estas técnicas han posibilitado el estudio de núcleos atómicos exóticos, así como núcleos en condiciones exóticas. Entendiendo por núcleos exóticos aquellos que se encuentran muy lejos del valle de la estabilidad, esto es, núcleos con gran isospín o núcleos superpesados (aquellos que tienen un gran número másico). Se entiende por núcleos en condiciones exóticas, los núcleos que se encuentran en el valle de la estabilidad (o muy próximos a él) pero bajo condiciones tales como: alto momento angular ( $I \approx 40 - 80\hbar$ ), muy alta energía de excitación o grandes deformaciones. Todo ello, está revelando aspectos fundamentales como la determinación de las líneas de goteo (*drip-lines*) de neutrones o de protones y las desintegraciones de protones en las proximidades de dicha línea, la síntesis de núcleos superpesados e islas de estabilidad, la aparición de halos y pieles de neutrones, coexistencia de forma y superdeformación, degradación y la aparición de nuevos números mágicos, etc [3].

No sólo eso, el desafío continúa. La nueva generación de instalaciones en todo el mundo: GSI-FAIR [4], GANIL-SPIRAL-2 [5], CERN-HIE-ISOLDE [6] en Europa; RIBF-RIKEN [7] en Japón ó la futura MSU-FRIB [8] en Estados Unidos y la cantidad de observaciones experimentales que son (y serán) descubiertas en los numerosos proyectos que allí se desarrollarán, tendrán que ser explicadas desde el punto de vista de la física nuclear teórica. Se espera que esa conjunción, entre la parte teórica y experimental, siga aportando respuestas al campo de la estructura nuclear, cuyo objetivo final es el conocimiento unificado de las propiedades nucleares a partir de las interacciones fundamentales entre los nucleones.

Es necesario el desarrollo de herramientas teóricas adecuadas que permitan la comprensión de la estructura nuclear a lo largo de toda la tabla de núcleos y que se encuentren en consonancia con la gran cantidad de resultados experimentales, que como hemos visto, la física nuclear experimental demanda. Actualmente, la física nuclear teórica también trata de mejorar el conocimiento sobre los fenómenos nucleares bien mejorando los métodos y modelos existentes o bien introduciendo nuevas técnicas, de entre los que cabe destacar:

- Métodos ab-initio y diagonalizaciones exactas en sistemas de pocos cuerpos son ahora posibles [9].
- Conexión de las interacciones nucleares desnudas con QCD a partir de teorías de campo efectivas quirales [10, 11].

- El aumento de la capacidad de computación permite hoy en día hacer cálculos del modelo de capas con espacios mayores. [12].
- Desarrollo de las teorías más allá del campo medio con interacciones dependientes de la densidad. [13].

El contexto en el que se encuentra enmarcado este trabajo es el de la física nuclear teórica y dentro de los modelos nucleares teóricos de que se disponen, la memoria aquí presentada, está englobada dentro de la aproximación de campo medio autoconsistente. Esta aproximación considera al núcleo como un sistema de partículas o cuasipartículas que no interactúan entre sí y que se encuentran sometidas a un potencial promedio que liga el sistema. Este potencial es calculado de manera autoconsistente haciendo uso del método variacional para encontrar el hamiltoniano de cuasipartículas independientes óptimo del problema nuclear de muchos cuerpos. Para ello se usa el método de Hartree-Fock (HF) y su extensión, el método de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB), con interacciones efectivas (interacción de Gogny en nuestro caso particular) que sean capaces de describir propiedades en cualquier región de la tabla de núclidos.

En estos métodos, la función de onda que describe el sistema de muchos cuerpos es un producto de funciones de onda de una cuasipartícula. Para que el espacio variacional sea lo mayor posible se admite la ruptura espontánea de las simetrías del hamiltoniano, como por ejemplo, del número de partículas y la invariancia rotacional, que van a permitir la descripción de fenómenos colectivos como la superfluidez nuclear o la aparición de bandas rotacionales respectivamente. Sin embargo, para describir adecuadamente el núcleo atómico deberemos ir más allá de la aproximación de campo medio y restaurar dichas simetrías. Además, es posible una mejora de dicha descripción si se considera la función de onda final como una combinación lineal de funciones de onda tipo producto con las simetrías ya restauradas, idea que subyace tras el método del generador de coordenadas.

Los métodos de campo medio con interacciones efectivas realistas han sido ampliamente estudiados [13–16] incluyendo restauración de simetrías (simultáneas del número de partículas y el momento angular) y mezcla de configuraciones y siguen demostrando ser una potente herramienta para describir las propiedades de los núcleos atómicos.

El desarrollo y avance de la computación científica nos permite y anima a implementar mejoras en nuestros cálculos teóricos de campo medio, lo que hace unos años era una limitación de cálculo computacional, hoy deja de serlo.

Por otra parte, es sabido que de entre las diferentes variables colectivas que

pueden incluirse en el estudio de las correlaciones de apareamiento en el marco de las técnicas de proyección, la que nos ofrece una contribución mayor a la energía, es la deformación asociada al momento cuadrupolar [17]. Sin embargo, es deseable la inclusión de cuantas más correlaciones mejor para aproximarnos a la solución más exacta del problema.

Cuando sólo la deformación cuadrupolar es tenida en cuenta, se observa que los valores que se obtienen de forma teórica para observables relevantes tales como las energías de excitación ó las probabilidades de transición, si bien muestran un acuerdo cualitativo con lo obtenido experimentalmente, presentan, en general, valores ligeramente superiores [14]. Este trabajo tiene entre sus objetivos comprobar si el hecho de incluir una coordenada extra en el sistema de estudio, puede completar la descripción teórica de manera que suponga una mejora acercándonos a los datos experimentales.

Es la unión de estos dos aspectos, la necesidad de incluir más grados de libertad en el sistema unido a la mejora de la capacidad de computación que permite llevarlo a cabo, lo que ha motivado este trabajo que recoge el análisis y los resultados de considerar por primera vez las fluctuaciones de apareamiento [18, 19].

El estudio de las fluctuaciones de apareamiento es relevante por diversos motivos [20–26]. Por un lado los grados de libertad más relevantes a considerar, son el monopolar (el apareamiento) y el cuadrupolar (la deformación) por lo que es deseable tratar a ambos en igualdad de condiciones. Por otro lado, el principio variacional de Ritz con ligaduras, con el que se determina la base de estados intrínsecos, es muy efectivo para determinar las funciones de onda de los estados de la base favoreciendo, por construcción, encontrar dichos estados en cálculos con restauración de simetrías y mezcla de configuraciones (como es nuestro caso). Sin embargo, el describir, dentro del mismo marco, correctamente estados excitados, para los cuales pueden cambiar sus números cuánticos, va a depender de tener una buena base. El hecho de aumentar el número de coordenadas nos ofrece una base mayor en la cual los estados excitados se encuentren mejor descritos. Por ejemplo, es típico de los cálculos con proyecciones obtener espectros de energía más estirados que las predicciones experimentales, al aumentar el tamaño de la base incluyendo un nuevo grado de libertad, esperamos obtener espectros más comprimidos. Por último, el estudiar de forma simultánea la forma y las fluctuaciones de apareamiento va a permitir hacer un análisis sobre si las vibraciones de apareamiento existen de forma genuina o cómo se amortiguan cuando ambos grados de libertad son acoplados.

Esta memoria de tesis, basada en las siguientes publicaciones ( [27–29]),



está estructurada de la siguiente manera: en el siguiente capítulo, [2](#), se describen los modelos de estructura nuclear teóricos e interacciones fenomenológicas realistas más utilizadas para poner en el contexto adecuado los métodos que van a ser empleados en este trabajo. En el capítulo [3](#) se detallan los fundamentos teóricos de las aproximaciones de campo medio y más allá. Los métodos de restauración de simetrías con proyección junto con el método de la coordenada generadora se detallan también en este capítulo. En el capítulo [4](#) se introduce la nueva coordenada, se presenta el método de trabajo y se ofrecen los detalles más técnicos de los cálculos tomando como ejemplo el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ . El capítulo [5](#) está dedicado al estudio del efecto de la proyección del número de partículas. Se analiza su relevancia para tener una descripción correcta de los estados nucleares. En el capítulo [6](#) se discuten las superficies de energía potencial y con especial detalle, los espectros de excitación para diversos núcleos como función de las dos coordenadas consideradas y en base a tres diferentes aproximaciones. Los resultados de calcular otros observables nucleares relevantes como probabilidades de transición o energías de separación se exponen en el capítulo [7](#). En el capítulo [8](#) se discuten las funciones de onda en diferentes aproximaciones estableciendo las analogías correspondientes con las superficies de potencial mostradas anteriormente. Además, en este capítulo también se va a tratar de forma minuciosa la cuestión de la existencia de vibraciones genuinas de apareamiento. El capítulo [9](#) se centra en el tema de las desintegraciones doble beta sin emisión de neutrinos. Los elementos de matriz nuclear para los 11 candidatos más probables a desintegrarse en este modo se han calculado teniendo en cuenta la deformación y las fluctuaciones de apareamiento. Por último, las conclusiones de este trabajo y perspectivas futuras que ofrece, se recogen en el capítulo [10](#). Como anexo, en el apéndice [A](#) se muestra una lista de acrónimos que han sido utilizados a lo largo de la memoria como guía para el lector. Los apéndices [B](#) [C](#) [D](#) y [E](#) son para desarrollar en más detalle expresiones teóricas que se han utilizado.



# Capítulo 2

## Modelos de estructura nuclear

### 2.1. Introducción

Para describir la dinámica de un núcleo atómico nos encontramos por un lado con el problema cuántico de muchos cuerpos que no es resoluble a partir de un cierto número de nucleones. Por otro lado, el número de nucleones presente en el núcleo dista mucho de ser suficientemente grande como para abordar el problema desde la perspectiva de la física estadística. Para aproximarnos a la solución del problema, es necesario el uso de modelos o métodos que permitan describir la estructura nuclear. Estos modelos van a ser diferentes en sus suposiciones y aproximaciones, de manera que en función de lo que se quiera investigar, un método puede resultar más apropiado que otro para la resolución de un problema concreto. De esta manera, vamos a disponer de métodos complementarios que van a describir diferentes manifestaciones del comportamiento nuclear.

Podemos hacer la siguiente clasificación entre los modelos nucleares que pueden ser utilizados.

- Modelos microscópicos:  
El punto de partida para los modelos microscópicos (entendidos como los que consideran los protones y neutrones como grados de libertad) en la física nuclear es la definición de la interacción entre los nucleones constituyentes. Estas interacciones pueden ser definidas a partir de interacciones desnudas entre los nucleones, también llamadas interacciones realistas, o pueden tener en cuenta los efectos del medio nuclear. Éstas, son las interacciones fenomenológicas. En ambos casos, hay parámetros o constantes de acoplamiento que deben ser ajustadas para reproducir algunos conjuntos de datos experimentales.

Dentro de los modelos microscópicos se distinguen, dependiendo del origen de la interacción nuclear:

- Cálculos ab-initio, si las interacciones se extraen directamente a partir de las interacciones NN (nucleón-nucleón) y NNN desnudas, normalmente por renormalización de dichas interacciones. Los métodos de resolución de problemas de muchos cuerpos usados con interacciones ab-initio van desde diagonalizaciones exactas, al modelo de capas sin *core* (no core shell model, NCSM) [30], el método de Monte Carlo con funciones de Green [31], o el método de los *clusters* acoplados (coupled clusters, CC) [32]. Estos métodos se aplican a núcleos ligeros ( $A \leq 12$ ) con precisión y también para núcleos más pesados, mágicos o semimágicos.

- Cálculos fenomenológicos, si las interacciones nucleares, normalmente sólo NN, se ajustan a datos experimentales de núcleos finitos.

En este caso, se puede distinguir entre dos grandes grupos: el modelo de capas (interacting shell model, ISM) y el método de campo medio autoconsistente (self-consistent mean field, SCMF). Ambos modelos van a centrar nuestra atención en las secciones 2.2 y 2.3 de este capítulo donde se exponen sus características con más detalle.

Ambos modelos se basan en la idea de campo medio (mean field, MF); los nucleones se mueven como partículas independientes en un potencial promedio que crean el resto de nucleones. Este potencial va a ser fenomenológico y debe ser capaz de explicar las propiedades de los núcleos. La interacción entre nucleones es fuerte, por lo que esta aproximación puede parecer, a priori, poco apropiada. Sin embargo, dada la naturaleza fermiónica de los nucleones, vamos a encontrar que el principio de Pauli, aplicado sobre el medio nuclear, va a bloquear gran parte de los estados accesibles. Esto hace que el efecto de la interacción se reduzca; esto es, se hace más suave a cortas distancias, dando entonces sentido a las aproximaciones de campo medio.

- Modelos colectivos:

Los modelos colectivos describen propiedades globales de los núcleos. La idea básica en la que se apoyan los modelos de tipo macroscópico es la de tratar de describir el núcleo como un todo, es decir, estamos interesados en el movimiento colectivo de los nucleones.

Quizás el ejemplo más representativo sea el modelo de la gota líquida,

éste supone el núcleo como un fluido incompresible. Relacionados con el primero y englobados dentro de los modelos colectivos, están el modelo vibracional y rotacional [33]. Se puede encontrar su descripción en la sección 2.4.

- Modelos algebraicos:

Otra forma de abordar el problema es mediante modelos algebraicos. Estos modelos describen las excitaciones colectivas del núcleo por medio de métodos basados en las teorías de grupos y los conceptos de simetrías relacionados con ellos. El modelo de bosones interactuantes (de tipo fenomenológico) o el modelo SU(3) de Elliot (de tipo macroscópico) son ejemplos representativos de ellos. Se ampliará el modelo de bosones interactuantes en la sección 2.5.

## 2.2. Modelo de capas

El modelo de capas tiene su origen en el descubrimiento de que núcleos con cierto número de protones y neutrones mostraban ciertas propiedades asociadas a la presencia de capas cerradas de manera análoga a lo que ya se conocía para los átomos. Se observan saltos en las energías de separación de nucleones, mayores diferencias en las masas con el modelo de la gota líquida y mayores energías de excitación del primer estado excitado. A estos números se les dio el nombre de números mágicos [34, 35]. Los primeros en encontrarse fueron el 8 y 20. Es posible deducirlos si se asume un potencial de tipo oscilador armónico. Para obtener los siguientes números mágicos: 28, 50, 82 y 126 es necesario incluir un término de espín-órbita [36].

Se toman un conjunto completo de estados, normalmente los del oscilador armónico, como funciones de onda de partícula independiente y se define una base, en la que se va a diagonalizar el hamiltoniano, que sea un conjunto de productos antisimetrizados de dichas funciones de onda de una sola partícula. Esto se corresponde con un determinante de Slater. Finalmente la función de onda de muchos cuerpos será una combinación lineal de estos determinantes de Slater.

El principal problema que presenta el ISM es el tamaño de esta base, pues el número de determinantes de Slater crece combinatorialmente con el número de capas que se introducen en el cálculo, de modo que según aumenta el número de nucleones el cálculo se va complicando hasta hacerse computacionalmente intratable. Es necesario, entonces, hacer una aproximación para reducir este espacio de configuraciones y, para ello, se hace una división de dicho espacio aprovechando la estructura de niveles que dan los números

mágicos. Por un lado está el *core*, que comprende aquellas capas que están totalmente llenas de nucleones y que, por tanto, no van a jugar un papel en el problema que queremos resolver. Por otro lado, tenemos el *espacio de valencia*, que es donde se va a resolver el problema. En general, consta de una o dos capas mayores de oscilador donde los nucleones de valencia pueden estar situados. Por último, está el espacio externo que se asume que está totalmente vacío.

Dependiendo de la región de la tabla de núcleos en la que se va a trabajar, se toma un espacio de valencia y, adecuada a este espacio, una interacción efectiva que tratará de incluir en el espacio de valencia también correlaciones que no pertenecen a él mediante técnicas de proyección y/o renormalización. Una vez definidos el espacio de valencia y la interacción efectiva, en principio se efectúa una diagonalización exacta del hamiltoniano, con lo que se deben manejar códigos informáticos que permitan la resolución de problemas de autovalores de matrices gigantescas. Estos códigos constituyen junto con el espacio de valencia y las interacciones efectivas los tres pilares de los modernos cálculos del ISM. Para ver los espacios de valencia e interacciones efectivas empleadas en cálculos del modelo ISM se puede consultar [12, 13].

Las interacciones ajustadas a ciertas regiones, así como la diagonalización del problema en el espacio de valencia, hacen del ISM el método más preciso actual para calcular espectros nucleares. Sin embargo, esta dependencia de la interacción con el espacio de valencia hace que no sea un método universal y representa uno de los principales inconvenientes de este modelo.

Otro de los problemas que presenta este modelo es que es aplicable a núcleos con un espacio de valencia no demasiado grande, para que sea un problema computacionalmente factible, lo que nos restringe a núcleos con pocos nucleones fuera de capa. Tampoco será posible describir núcleos pesados donde el número de niveles cerca de la energía de Fermi sea muy grande.

### 2.3. Métodos de campo medio autoconsistente

Los modelos de campo medio autoconsistente resuelven el problema de muchos cuerpos de manera variacional, en espacios de configuración grandes y con interacciones nucleares que son "universales" (válidas a lo largo de toda la tabla de núcleos). Precisamente esta última característica es la que hacen más atractivos a este tipo de modelos, ya que permiten explicar diversas propiedades en regiones nucleares diferentes.

En esta aproximación se utiliza el método de HFB como punto de partida

para obtener las funciones de onda que van a ser de tipo producto. Para mejorar esta aproximación, se toma la extensión a métodos más allá del campo medio (beyond mean field, BMF) en la que se restauran las simetrías rotas a nivel de campo medio mediante técnicas de proyección y se permite la mezcla de configuraciones (symmetry conserving configuration mixing, SCCM) dentro del método de la coordenada generadora (generator coordinate method, GCM).

Estas teorías se encuentran explicadas con más detalle en el siguiente capítulo, ya que son el marco teórico de los cálculos que se presentan en esta memoria.

Como ya se ha mencionado en la introducción de este capítulo, en física nuclear los modelos microscópicos que estudian los núcleos atómicos se basan en la descripción del núcleo como un conjunto de nucleones que interactúan entre sí donde, además, es necesario determinar qué tipo de interacción nuclear vamos a considerar.

Para hallar dichas interacciones se puede proceder de dos maneras diferentes. Por un lado, se puede renormalizar la interacción nucleón-nucleón desnuda teniendo en cuenta que en el medio nuclear no todos los estados finales son accesibles en la dispersión de dos nucleones, sino que la mayoría de ellos se encuentran ocupados por otros nucleones. Este es el enfoque del método de Brueckner y la matriz  $G$  [37] o de los potenciales  $V_{lowk}$  o SRG [38].

El otro enfoque diferente sería la utilización de interacciones fenomenológicas efectivas que se usan en las aproximaciones de campo medio autoconsistentes (SCMF). Principalmente se tienen tres grupos de cálculos SCMF dependiendo de la interacción usada; interacción de Gogny [39, 40], interacción de Skyrme [41–44] o campo medio relativista [45]. En este caso se propone una forma funcional para la interacción que dependa de un conjunto de parámetros que se ajusten para describir propiedades macroscópicas en una región, lo más amplia posible, de la tabla de núcleos. Dichas interacciones tienen, como características principales, una parte de corto alcance repulsiva suave y, además, deben respetar las mismas invariancias que cumple la interacción nuclear desnuda, con la excepción de que estas interacciones, en general, incluyen un término dependiente de la densidad nuclear para que se respete la propiedad de saturación de la fuerza nuclear. Por otra parte, normalmente no incluyen un término tensor explícito.

Podemos distinguir entre varios tipos de interacciones efectivas fenomenológicas.

- Las interacciones de **Gogny** (descrita en la subsección 2.3.1) y **Skyrme** son las más usadas en cálculos de campo medio, son no relativistas y su dinámica viene gobernada por la ecuación de Schrödinger.

- Interacciones relativistas** Este tipo de interacciones se utilizan dentro de la aproximación de campo medio relativista (relativistic mean field, RMF). En el caso de tener un campo medio relativista, la dinámica del sistema va a venir gobernada por una densidad Lagrangiana efectiva que cumpla las simetrías de QCD (quantum chromodynamics), a partir de la que se deducen las ecuaciones de movimiento aplicando las expresiones correspondientes de teoría cuántica de campos. En este caso, son los valores de las constantes de acoplamiento de la densidad lagrangiana los que son ajustados como parámetros libres a los datos experimentales de los núcleos, así como a las propiedades de materia nuclear como en el caso no relativista.

### 2.3.1. Interacción de Gogny

Dedicamos esta sección a la interacción nuclear efectiva de Gogny [18, 39, 40] que es la que se ha utilizado a lo largo de este trabajo y por ello es tratada con especial atención.

La interacción de Gogny entre dos nucleones tiene un término central de rango finito (Brink-Boeker [46]) que consta de la suma de dos gaussianas de corto y largo alcance, un término de espín-órbita a dos cuerpos y un término dependiente de la densidad, estos dos últimos de contacto. Su expresión analítica es:

$$\begin{aligned}
 V(1, 2) = & \sum_{i=1}^2 e^{-\frac{(r_1 - r_2)^2}{\mu_i^2}} \left( W_i + B_i \hat{P}^\sigma - H_i \hat{P}^\tau - M_i \hat{P}^\sigma \hat{P}^\tau \right) \\
 & + i W_{LS} \left( \vec{\sigma}^{(1)} + \vec{\sigma}^{(2)} \right) \vec{k} \times \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \vec{k} + \\
 & t_3 \left( 1 + x_0 \hat{P}^\sigma \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left( \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right)
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

En esta expresión aparecen los operadores de intercambio de espín,  $\hat{P}^\sigma$  y de isospín  $\hat{P}^\tau$ , la densidad  $\rho$ , los operadores de espín  $\vec{\sigma}$ , las coordenadas de los nucleones  $\vec{r}_j$  y los momentos relativos  $\vec{k}$ . El primer sumando de la expresión (2.1) es el término central o de Brink-Boeker.

Se tienen como parámetros ajustables:  $\mu_1, W_i, B_i, H_i, M_i, \alpha, x_0, W_{LS}$  y  $t_3$  y tres parametrizaciones principales: D1, D1' y D1S. Primero se ajustaron los parámetros para los casos D1 y D1' [40, 47]. El término de espín-órbita se ajusta al valor del desdoblamiento de los niveles  $p_{3/2} - p_{1/2}$  del  $^{16}\text{O}$ . Para el término dependiente de la densidad se ajusta la diferencia de energía entre los niveles  $d_{3/2} - p_{1/2}$  también en el  $^{16}\text{O}$ . Los parámetros de la interacción central que van con los operadores de intercambio se ajustan para reproducir



propiedades de los núcleos  $^{16}\text{O}$  y  $^{90}\text{Zr}$ , mientras que las propiedades de apareamiento se obtienen a partir de la información para los isótopos del estaño. Para la parametrización D1S [48] se tuvieron en cuenta, además de las propiedades anteriores, otras referentes a la fisión, por ejemplo para el  $^{240}\text{Pu}$ . Existen otras dos parametrizaciones más recientes que cabe destacar: D1N [49] y D1M [50]. Con ellas se reproduce la ecuación de estado de materia neutrónica calculada con interacciones realistas y, con ello, se corrige la falta de energía de ligadura para núcleos ricos en neutrones. Por otra parte, mientras que todas las interacciones se ajustan a propiedades de unos pocos núcleos y con funciones de onda de campo medio, la D1M se ajusta usando las soluciones del hamiltoniano colectivo 5D (BMF) y ajustando a todas las masas de la compilación AME (atomic mass evaluation) 2003 [51, 52]. De las parametrizaciones que se encuentran para la interacción de Gogny, la más utilizada y la que aquí se ha utilizado es la D1S. Sus valores se muestran en la tabla (2.1).

i	$\mu(fm)$	$W(MeV)$	$B(MeV)$	$H(MeV)$	$M(MeV)$
1	0.7	-1720.30	1300.00	-1813.53	1397.60
2	1.20	103.64	-163.48	162.81	-223.93
		$\alpha$	$x_0$	$W_{LS}$	$t_3$
		1/3	1	130.00	1390.60

**Tabla 2.1:** Parametrización D1S para la interacción de Gogny

Si comparamos las interacciones de Gogny con la mencionada de Skyrme, veremos que los términos de espín-órbita y dependiente de la densidad son los mismos en ambas. Sin embargo, los términos de muy corto alcance de la fuerza de Skyrme, son sustituidos por el término de rango finito de Brink-Boeker compuesto por las dos gaussianas en el caso de Gogny. Esta es la principal ventaja de la interacción de Gogny sobre la de Skyrme, ya que este término introduce de manera natural el apareamiento y lo hace, además, con la misma interacción con la que se obtiene la parte de HF, ya que esto es esencial si se llevan a cabo cálculos más allá del campo medio [53–55] [56, 57].

## 2.4. Modelos colectivos nucleares

Esta cuestión puede ser estudiada desde otro punto de vista con este tipo de modelos, en los que las excitaciones de baja energía son tratadas de manera colectiva. Además, los espectros de excitación de núcleos par-par muestran

estructuras de banda características que pueden ser interpretadas como vibraciones y rotaciones de la superficie nuclear.

La capa cerrada en un núcleo es muy estable, pero según se suman más partículas, la estabilidad de ésta se ve reducida. Si se estudian las curvas de energía potencial en función de la deformación, a medida que se añaden más nucleones a una capa cerrada se pasa de una parábola, con centro en el caso esférico, a curvas cada vez más planas, hasta alcanzar un punto en el que el núcleo prefiere una forma deformada, ya que el mínimo ha abandonado la configuración esférica. De esta forma, según nos alejamos de la configuración de capa cerrada, el núcleo va a mostrar, primero algunos rasgos característicos vibratoriales del movimiento de núcleos suavemente deformados y, más lejos, rasgos característicos rotacionales del movimiento de núcleos permanentemente deformados.

Veamos las características principales que presentan cada uno de estos modelos [58]:

a) **Modelo colectivo vibracional:**

- Se utiliza para núcleos par-par con  $A < 150$ .
- El núcleo se presenta como una gota líquida vibrando a alta frecuencia, cuya forma en promedio es esférica, con radio medio  $R_0$
- La posición instantánea de un punto de la superficie vendrá dada por:

$$R(\theta, \varphi, t) = R_0 \left( 1 + \sum_{\lambda\mu} \alpha_{\lambda\mu}(t) Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \right), \quad (2.2)$$

donde  $\lambda$  va a describir la multipolaridad.

- Cada modo de vibración está caracterizado por  $\lambda$ . El modo fundamental del modelo vibracional, son las vibraciones cuadrupolares, esto es,  $\lambda = 2$ . Introduce variaciones en la forma de la superficie del núcleo. Son vibraciones entre formas esféricas, prolates y oblates.
- Los estados correspondientes a un modo  $\lambda$  son estados propios de momento angular total  $J = \lambda$  y con paridad bien definida  $P = (-1)^\lambda$ .
- En analogía al caso electromagnético denominamos fonón al cuanto de energía vibracional.
- El espectro vibracional va a presentar la siguiente forma característica. Si consideremos el efecto de añadir un fonón cuadrupolar al estado fundamental, tendremos un estado  $2^+$ . Si suponemos una excitación

de dos fonones cuadrupolares, van a aparecer tres estados  $0^+ 2^+ 4^+$  con energías al doble que el primer estado excitado. Tres fonones cuadrupolares generan estados con  $J = 0^+ 2^+ 3^+ 4^+ 6^+$  con una energía triple.

- A partir de la estructura de niveles, el modelo vibracional predice hechos como que el estado fundamental  $0^+$  es esférico y que el cociente  $E(4^+)/E(2^+) \approx 2$ .

#### b) Modelo colectivo rotacional:

- El modelo rotacional se aplica a los llamados núcleos deformados, es decir, que no tienen una posición de equilibrio esférica y se encuentran alejados de las regiones de los números mágicos. Región de  $150 < A < 90$  y  $A > 220$ ; región de tierras raras y actínidos; núcleos de la capa s-d, es decir, núcleos con número mágico  $A \sim 24$ .
- La forma de los núcleos deformados puede expresarse como un elipsoide de revolución.
- El espectro rotacional típico muestra una secuencia de estados con energías proporcionales a  $J(J+1)$ . Al incrementar el número cuántico  $J$  se está aumentando la energía rotacional del núcleo, formando así los estados excitados una secuencia de bandas conocidas como bandas rotacionales.
- Los núcleos deformados también presentan vibraciones de dos tipos: vibraciones  $\beta$  y  $\gamma$ , dependiendo de la proyección  $K$  del momento angular del fonón a lo largo del eje de simetría fijo en el cuerpo. Las vibraciones  $\beta$  tienen  $K = 0$ , por lo tanto, conservan la simetría alrededor del eje, mientras que las vibraciones  $\gamma$  con  $K = 2$  no.

## 2.5. Modelos algebraicos

En los modelos algebraicos se describen excitaciones colectivas de los núcleos por medio de teorías de grupos y los conceptos de simetría relacionados con ellos [59].

Un ejemplo de este tipo de modelos es el modelo de bosones interactuantes (interacting boson model, IBM) [60], en el que las excitaciones colectivas de núcleos par-par están caracterizadas por un número fijo de  $N$  bosones de dos tipos  $s$  y  $d$  con número cuánticos  $0^+$  y  $2^+$  respectivamente. Dentro del

modelo IBM encontramos algunas extensiones. En el IBM-1 no se hace distinción entre bosones formados por neutrones o protones. El caso contrario es el IBM-2 donde sí se hace esta distinción.

El IBM ofrece una alternativa al modelo de capas, ya que para un número elevado de nucleones y capas, el número de configuraciones posibles para describir un estado puede llegar a ser tan alto que no sea abordable desde esta perspectiva el problema. El IBM reduce el número de configuraciones posibles truncando el espacio de Hilbert en el que se trabaja, obteniendo así un subespacio manejable. Para ello, se *bosoniza* el espacio teniendo en cuenta parejas de nucleones (o huecos) de valencia con momento angular  $0^+$  (pareja S) y  $2^+$  (pareja D). Estas parejas pueden ser de protones o neutrones. Los estados de parejas S y D están relacionadas con los estados bosónicos  $s$  y  $d$ . Dos nucleones con el mismo momento angular y diferente proyección se acoplan para obtener un estado con momento angular cero y proyección cero (pareja S), creando el bosón  $s$ , de igual manera para las parejas D, se acoplan dos nucleones con distintos momentos angulares para obtener un estado con momento angular 2 que se corresponde con el bosón  $d$ .

Formalmente, la estructura nuclear se reduce a resolver el problema de  $N$  bosones interactuantes tipo  $s$  y  $d$ . El número de  $N$  bosones se cuenta para la capa cerrada más cercana. Por ejemplo, para el núcleo  $^{110}\text{Cd}$ , se tiene  $Z=48$  y  $N=62$ . Para protones, el cierre de capa está en  $Z=50$ , por lo que se tienen dos protones (huecos) de valencia que corresponden a un bosón. Para los neutrones, la capa cerrada más próxima es de nuevo  $N=50$  por lo que se tienen 12 neutrones de valencia, que se corresponden con 6 bosones, de modo que  $N = 7$ .

Las 5 componentes del estado de bosones  $d$ , más la componente del estado de bosones  $s$ , definen un espacio vectorial de seis dimensiones. De modo que la estructura algebraica para el IBM viene dada por el grupo  $U(6)$  del álgebra de Lie.

Este modelo se emplea en el estudio de núcleos intermedio y pesados, permite determinar momentos nucleares, niveles de energía y probabilidades de transición. Todos los observables físicos van a ser derivados de métodos de teorías de grupos y expresados analíticamente, partiendo de que el álgebra que lo describe es la dada por  $U(6)$ .

# Capítulo 3

## Método de HFB y teorías más allá del campo medio

### 3.1. Introducción

El método de HFB es la teoría en la que se fundamentan los cálculos que se han desarrollado en este trabajo, por tanto este capítulo trata de explicar los aspectos fundamentales de esta aproximación y de sus extensiones; la restauración de simetrías y el método de la coordenada generadora. Para abordar este problema se postula un conjunto de funciones de onda prueba y se hace uso del Principio Variacional para encontrar como solución al problema aquella que minimiza la energía del sistema, obteniendo de esta manera una solución aproximada a la energía y a la función de onda del estado fundamental. Imponiendo condiciones de ortogonalidad, es posible construir los estados excitados.

En un sistema fermiónico, como es el núcleo atómico, el espacio de funciones de onda más sencillo que podemos tomar como prueba corresponde a un determinante de Slater: un conjunto de productos antisimetrizados de funciones de onda de una sola partícula.

El método de Bardeen, Cooper y Schrieffer para el estudio de la superconductividad fue aplicado posteriormente al caso nuclear por Bohr, Mottelson y Pines [61]. Mediante la transformación de Bogoliubov, se pasa a considerar el núcleo como un conjunto de *cuasipartículas* independientes que no interactúan entre sí. De esta manera, se tiene una función de onda producto, esto es, un producto antisimetrizado de funciones de onda de una cuasipartícula. Esto, permite incluir correlaciones de apareamiento [62] que van a ser capaces de describir fenómenos como la superconductividad o superfluidez

nuclear.

La generalización de ambos métodos, HF y BCS (Bardeen Cooper Schrieffer), da lugar a la teoría de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB). En el modelo HFB se tratan al mismo nivel las correlaciones nucleares de largo alcance (correlaciones partícula-hueco), que vienen descritas por el campo de Hartree-Fock ( $\Gamma$ ) y las correlaciones que vienen de la parte de corto alcance de la fuerza nuclear (correlaciones partícula-partícula) y que vienen dadas por el campo de apareamiento ( $\Delta$ ).

### 3.2. Ecuaciones de HFB

Sean  $c_l^\dagger$ ,  $c_l$  los operadores de creación y destrucción de partículas donde el subíndice  $l$  se refiere a los números cuánticos que caracterizan a un estado de un oscilador armónico. Estos operadores cumplen que:

a) El operador destrucción aplicado sobre el vacío de partículas da cero.

$$c_l|-\rangle = 0. \quad (3.1)$$

b) El operador creación aplicado sobre el vacío de partículas crea el estado  $l$ .

$$c_l^\dagger|-\rangle = |l\rangle. \quad (3.2)$$

Se conoce con el nombre de transformación de Bogoliubov, a la transformación lineal más general entre los operadores de creación y destrucción de partículas [63] que va a definir los operadores de cuasipartículas:

$$\beta_k^\dagger = \sum_l U_{lk} c_l^\dagger + V_{lk} c_l, \quad (3.3)$$

donde  $l$ ,  $k$  son índices que van desde uno hasta la dimensión del espacio de configuración  $M$ . Los operadores  $\beta_k^\dagger$ ,  $\beta_k$  son los operadores de creación y destrucción de cuasipartículas. Éstos, cumplen las relaciones de anticonmutación:

$$\{\beta_i^\dagger, \beta_j\} = \delta_{ij}, \quad (3.4)$$

$$\{\beta_i^\dagger, \beta_j^\dagger\} = \{\beta_i, \beta_j\} = 0. \quad (3.5)$$

La transformación (3.3) puede expresarse en términos matriciales [58] como:

$$\begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger & V^\dagger \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = W^\dagger \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.6)$$

Las relaciones de conmutación expresadas en (3.4) (3.5) imponen la unitariedad de  $W$ .

$$WW^\dagger = W^\dagger W = I, \quad (3.7)$$

de forma que la expresión (3.6) es invertible:

$$\begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} \beta \\ \beta^\dagger \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Las matrices de la transformación  $U$  y  $V$  deben satisfacer por tanto, las siguientes propiedades:

$$U^\dagger U + V^\dagger V = I \quad UU^\dagger + V^* V^T = I, \quad (3.9)$$

$$U^\dagger V + V^\dagger U = 0 \quad UV^\dagger + V^* U^T = 0. \quad (3.10)$$

El teorema de Bloch-Messiah [58, 64] demuestra que la transformación general de Bogoliubov puede ser reducida a tres transformaciones sucesivas de la siguiente forma:

1) Una transformación unitaria  $D$  entre operadores de partícula, que permite refinar una nueva base (base canónica):

$$a_k^\dagger = \sum_l D_{lk} c_l^\dagger. \quad (3.11)$$

En esta nueva base, la matriz densidad ( $\rho$ ) va a ser diagonal.

2) Una transformación de tipo BCS (llamada transformación especial de Bogoliubov):

$$\begin{aligned} \alpha_k^\dagger &= u_k a_k^\dagger - v_k a_{\bar{k}} \\ \alpha_{\bar{k}^\dagger} &= u_k a_{\bar{k}}^\dagger - v_k a_k, \end{aligned} \quad (3.12)$$

donde  $\alpha_k^\dagger$  y  $\alpha_{\bar{k}^\dagger}$  son estados de de cuasipartículas canónicamente conjugados. Dentro del marco de la teoría BCS, ambos estados conjugados están relacionados mediante la simetría de inversión temporal.

3) Una transformación unitaria "C" de las cuasipartículas entre ellas mismas:

$$\beta_k^\dagger = \sum_l C_{lk} \alpha_l^\dagger. \quad (3.13)$$

La función de onda prueba  $|\Phi\rangle$  que describe al sistema nuclear dentro de la aproximación de HFB viene dada a través de las cuasipartículas así definidas, del siguiente modo:

$$|\Phi\rangle = \prod_k \beta_k |-\rangle, \quad (3.14)$$

donde  $|-\rangle$  es el vacío de partículas. La función  $|\Phi\rangle$  es el vacío de quasipartículas, ya que verifica:

$$\beta_k |\Phi\rangle = 0 \quad \forall k = 1, \dots, M. \quad (3.15)$$

El hamiltoniano, en representación de los operadores de partícula, que describe el sistema tiene la forma:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}, \quad (3.16)$$

donde definimos:

a) El término cinético:

$$t_{l_1 l_2} = \langle l_1 | \hat{T} | l_2 \rangle \quad (3.17)$$

b) El término potencial antisimetrizado:

$$\bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} = v_{l_1 l_2 l_3 l_4} - v_{l_1 l_2 l_4 l_3} \quad (3.18)$$

$$v_{l_1 l_2 l_3 l_4} = \langle l_1 l_2 | \hat{V} | l_3 l_4 \rangle \quad (3.19)$$

Teniendo en cuenta la transformación de Bogoliubov (3.6), se puede escribir el hamiltoniano (3.16) en la base de cuasipartículas [58]:

$$\hat{H} = H_0 + \sum_{l_1 l_2} H_{l_1 l_2}^{10} \beta_{l_1}^\dagger \beta_{l_2} + \sum_{l_1 < l_2} \left( H_{l_1 l_2}^{20} \beta_{l_1}^\dagger \beta_{l_2}^\dagger + h.c \right) + H_{int}, \quad (3.20)$$

donde las matrices  $H_{ij}^{cd}$  se refieren a la parte del hamiltoniano con  $c$  operadores de creación de cuasipartículas y  $d$  de destrucción. La parte  $h.c$  se refiere a la parte hermítica conjugada y se denota como  $H_{int}$  al conjunto de contribuciones  $H^{31}$ ,  $H^{13}$ ,  $H^{40}$ ,  $H^{04}$  y  $H^{22}$ , provenientes de la parte a dos cuerpos del hamiltoniano y que representa la interacción entre más de dos cuasipartículas.

Los coeficientes  $U_{lk}$  y  $V_{lk}$  de la transformación de HFB no están definidos de manera única por la función de onda HFB. Por ello, es útil definir dos cantidades importantes que van a determinar la función  $|\Phi\rangle$  de forma unívoca y que viene dadas por sus elementos de matriz en la base de partículas:



a) La matriz densidad:  $\rho_{ll'} = \langle \Phi | c_l^\dagger c_l | \Phi \rangle = (V^* V^T)_{ll'}$

b) El tensor de apareamiento:  $\kappa_{ll'} = \langle \Phi | c_l c_l | \Phi \rangle = (V^* U^T)_{ll'}$ ,

Aplicando el Teorema de Wick<sup>1</sup> [65], se puede demostrar que el valor esperado de cualquier operador evaluado entre las funciones de onda  $|\Phi\rangle$  se puede expresar en función de la matriz densidad y del tensor de apareamiento. En particular, la energía de HFB, tomando la expresión del hamiltoniano de la ecuación (3.20), viene dada por:

$$E_{\text{HFB}} = \frac{\langle \Phi | H | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \frac{\langle \Phi | c_{l_1}^\dagger c_{l_2} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}. \quad (3.21)$$

El primer término, correspondiente a la Energía cinética:

$$\frac{\langle \Phi | \hat{T} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \frac{\langle \Phi | c_{l_1}^\dagger c_{l_2} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \rho_{l_2 l_1} = \text{Tr}(t\rho). \quad (3.22)$$

Haciendo uso del Teorema de Wick, se toman las contracciones de los operadores de partículas definidas para las funciones de onda correspondientes y se desarrolla la parte correspondiente al potencial:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Phi | V | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} &= \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} (\widehat{c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}} - \widehat{c_{l_1}^\dagger c_{l_4} c_{l_2}^\dagger c_{l_3}} + \widehat{c_{l_1}^\dagger c_{l_3} c_{l_2}^\dagger c_{l_4}}) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} (\kappa_{l_1 l_2}^* \kappa_{l_3 l_4} - \rho_{l_4 l_1} \rho_{l_3 l_2} + \rho_{l_3 l_1} \rho_{l_4 l_2}) \end{aligned} \quad (3.23)$$

A continuación definimos el campo de Hartree-Fock como:

$$\Gamma_{l_1 l_3} = \sum_{l_2 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_4 l_2}, \quad (3.24)$$

y el campo de apareamiento:

$$\Delta_{l_1 l_2} = \frac{1}{2} \sum_{l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \kappa_{l_4 l_2}. \quad (3.25)$$

La expresión de la Energía potencial será:

$$\frac{\langle \Phi | \hat{V} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{1}{2} \text{Tr}(\Gamma\rho - \Delta\kappa^*). \quad (3.26)$$

---

<sup>1</sup>En el apéndice B se puede ver con más detalle estos desarrollos.

La expresión final para el valor esperado del hamiltoniano entre estados HFB se expresa como:

$$E_{\text{HFB}} = \text{Tr}(t\rho + \frac{1}{2}(\Gamma\rho - \Delta\kappa^*)). \quad (3.27)$$

La energía de apareamiento, que va a ser una magnitud relevante en nuestro estudio, se corresponde con el término:

$$E_{\text{pair}} = -\frac{1}{2}\text{Tr}(\Delta\kappa^*). \quad (3.28)$$

Una vez definido el espacio variacional como las funciones de onda (3.14) que son vacío de los operadores de cuasipartículas, tenemos que encontrar los operadores  $\beta_k^\dagger \beta_k$  que minimizan:

$$E(|\Phi\rangle) = \frac{\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} \quad (3.29)$$

Esto es equivalente a encontrar las matrices  $U$  y  $V$  de la transformación de HFB que minimizan el funcional anterior. Sin embargo, la parametrización de la energía en términos de estas matrices está sujeta a las relaciones de unitariedad expresadas en (3.7). Por ello resulta más adecuado hacer uso de una parametrización de la función de onda de HFB dada por el Teorema de Thouless [66]. Dicho Teorema nos dice que dada una función de onda arbitraria de tipo producto  $|\Phi\rangle$  que sea vacío de unos operadores de cuasipartículas, podemos construir otra función de onda producto  $|\Phi(Z)\rangle$  no ortogonal a la primera y relacionadas mediante la matriz antisimétrica  $Z$  de la siguiente manera:

$$|\Phi(Z)\rangle = \langle\Phi|\Phi(Z)\rangle \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_w Z_{wv} \beta_w^\dagger \beta_v^\dagger\right\} |\Phi\rangle \quad (3.30)$$

$Z_{wv}$  son variables independientes, que son usados como parámetros variacionales. Se aplica el principio variacional ( $\delta E = 0$ ) a la ecuación (3.29) para las funciones de onda prueba. La solución  $|\Phi\rangle$  de la ecuación variacional que queda, se corresponde con  $Z_{wv} = 0$ . De modo que la expresión que se obtiene es:

$$\left(\frac{\partial E(Z)}{\partial Z}\right)_{Z=0} = 0 \quad (3.31)$$

Evaluamos ahora la expresión anterior en  $Z = 0$ , sustituimos el hamiltoniano por su expresión en la base de cuasipartículas 3.20 y hacemos uso del Teorema de Wick [58]:

$$\left(\frac{\partial E(Z)}{\partial Z}\right)_{Z=0} = \frac{\langle \Phi | \hat{H} \beta_{k'}^\dagger \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2} H_{l_1 l_2}^{02} \frac{\langle \Phi | \beta_{l_1} \beta_{l_2} \beta_{k'}^\dagger \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \quad (3.32)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2} H_{l_1 l_2}^{02} (\delta_{kl_2} \delta_{k'l_1} - \delta_{kl_1} \delta_{k'l_2}) = -H_{kk'}^{02} = 0 \quad (3.33)$$

Por último con la propiedad  $O^{20} = (O^{02})^\dagger = -(O^{20})^T$  podremos decir que los operadores de cuasipartículas que buscamos, son aquellos para los que:

$$H_{kk'}^{20} = 0. \quad (3.34)$$

Conviene destacar en este punto que la transformación de HFB (3.3) viola las simetrías del hamiltoniano. Esto permite aumentar el espacio variacional para lograr una solución más cercana a la exacta, pero manteniendo la estructura de función de onda producto. En particular, hace que la función de onda  $|\Phi\rangle$  no conserve el número de partículas. Además, en general, también se viola la simetría rotacional, por lo que, en principio, ni el momento angular ni el número de partículas van a ser buenos números cuánticos del sistema HFB. Es preciso, entonces, imponer la condición subsidiaria de que en promedio el número de partículas sea el correcto. Esto se consigue introduciendo una ligadura, con lo que en lugar de minimizar el funcional definido por el hamiltoniano  $H$ , se minimiza el funcional definido por:

$$H' = H - \lambda_N \hat{N} - \lambda_Z \hat{Z} \quad (3.35)$$

siendo los  $\lambda$  los multiplicadores de Lagrange que van a ser obtenidos imponiendo las ligaduras de que los valores esperados sean igual al número de partículas correctos:

$$\langle \Phi | \hat{N} | \Phi \rangle = N_0 \quad (3.36)$$

$$\langle \Phi | \hat{Z} | \Phi \rangle = Z_0 \quad (3.37)$$

Pero además, este caso es generalizable y es posible suponer que hay más ligaduras para cualquier operador  $\hat{Q}_i$  de interés como la deformación cuadrupolar, las fluctuaciones en el número de partículas, etc. De este modo el hamiltoniano más general vendrá dado por la expresión:

$$H' = H - \lambda_N \hat{N} - \lambda_Z \hat{Z} - \sum_i \lambda_{Q_i} \hat{Q}_i, \quad (3.38)$$

con la condición:

$$\langle \Phi | \hat{Q}_i | \Phi \rangle = q_{0i}. \quad (3.39)$$

Este es denominado método de HFB con ligaduras o constreñido (*constrained HFB*). Este hamiltoniano es el que debe introducirse en la expresión que va a ser minimizada (3.29). Este método permite explorar la dependencia de la energía como función de ciertos observables. Por ejemplo, si se constriñe en el operador  $\hat{Q}_i = \hat{Q}_{20}$ , podremos definir una superficie de energía potencial como función de la deformación cuadrupolar. Esto es extensible a otros grados de libertad.

Con este hamiltoniano, la condición (3.34), queda ahora de la forma:

$$H'^{20} = H^{20} - \lambda_N N^{20} - \lambda_Z Z^{20} - \sum_i \lambda_{Q_i} Q_i^{20} = 0, \quad (3.40)$$

Además, dado que esta condición sólo determina las dos primeras transformaciones (3.11,3.12) del Teorema de Bloch-Messiah [64], (ya que la ecuación variacional que hemos estudiado no se ve afectada por la transformación entre los operadores de cuasipartículas) es habitual imponer la condición:

$$H'^{11} = E_k \delta_{kl}, \quad (3.41)$$

para determinar la tercera transformación (3.13).  $E_k$  son las energías de cuasipartícula (ver más abajo). Esto nos permite deducir las ecuaciones de HFB en forma matricial en la base de quasipartículas:

$$\begin{pmatrix} H'^{11} & H'^{20} \\ -H'^{20*} & -H'^{11*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E_k & 0 \\ 0 & E_k \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

Transformado a la base de los operadores de partículas  $c$  y  $c^\dagger$ , las ecuaciones anteriores toman la forma:

$$\begin{pmatrix} h' & \Delta \\ -\Delta^* & -h'^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} U_k \\ V_k \end{pmatrix}, \quad (3.43)$$

donde:

$$h' = t + \Gamma + \delta\Gamma - \lambda_N - \lambda_Z - \sum_i \lambda_i \quad (3.44)$$

Debido a que el hamiltoniano depende explícitamente de la densidad, aparecen en las ecuaciones de HFB los campos ( $\delta\Gamma$ ) que son los denominados términos de reacomplamiento (*rearrangement terms*).

Son ecuaciones no lineales cuya resolución se ha hecho de forma autoconsistente con el método del gradiente [67]. Así, finalmente encontramos la

solución al problema variacional con ligaduras planteado y encontramos las funciones de onda  $|\Phi_{\text{HFB}}(q_{0i})\rangle$  con las que se pueden hallar valores esperados de operadores de interés físico. En particular, se pueden definir superficies de energía potencial dando valores a las ligaduras  $q_{0i}$

### 3.3. Ruptura de las simetrías.

En el caso general de tener bastante partículas y fuertes correlaciones, el correcto tratamiento de las simetrías no es una cuestión trivial; por un lado queremos describir el sistema con funciones de onda sencillas que sean tipo producto de las de una quasipartícula. Por otro lado, no es posible tener en cuenta importantes correlaciones si no se permite a las funciones de onda que rompan ciertas simetrías.

Las correlaciones de tipo partícula-hueco, que son las responsables de causar deformaciones y las correlaciones partícula-partícula, que son las que describen propiedades superfluidas, son correlaciones que van a ser incluidas a nivel de campo medio. En la sección anterior hemos visto cómo son tratadas dentro de la teoría HFB. Esto nos llevó a encontrar funciones de onda de tipo HFB  $|\Phi\rangle$ , que si bien eran capaces de incluir correlaciones entre las partículas, no eran autoestados de los operadores de simetría. En concreto la aproximación de campo medio de HFB, violaba la simetría de invariancia bajo rotaciones (asociadas al campo  $\Gamma$ ) y del número de partículas (asociada al campo  $\Delta$ ). Además cuanto mayores son estas correlaciones, mejor va a ser la aproximación de campo medio. En analogía a la física del estado sólido se suele decir que el sistema experimenta una transición de fase, como por ejemplo, a un estado deformado o superfluido donde las simetrías están rotas. Esta aproximación, si bien es capaz de describir algunas magnitudes nucleares, presenta limitaciones [58]:

- a) No es posible describir ciertas propiedades nucleares tan importantes como las probabilidades de transición o los espectros de energía, dentro de una aproximación pura de campo medio.
- b) La transición de fase, por ser el núcleo un sistema finito, se da de forma gradual entre la zona en la que se conserva la simetría y la zona donde se produce una débil ruptura y finalmente se encuentra la simetría fuertemente rota. En el caso de un débil ruptura de la simetría el método HFB no describe el problema de forma correcta.

Por estos dos motivos se hace necesario ir más allá de la aproximación de campo medio y restaurar las simetrías rotas a nivel de campo medio. Para ello, se hace uso de las técnicas de proyección [68–70] que van a ser desarrolladas en la sección 3.4. Además, la aproximación de campo medio, ya sea en

su formulación más sencilla o únicamente con restauración de las simetrías, no es capaz de incluir mezcla de configuraciones para explicar, por ejemplo, mezclas o coexistencias de forma. Por eso, es necesario usar el método GCM. Podemos ver con más detalle el mecanismo de ruptura de simetrías en la aproximación de campo medio. Para ello, establecemos una analogía entre las magnitudes que describen la transición que se da de esférico a deformado (parte izquierda de la tabla 3.1) y otra que nos lleva desde un núcleo normal a uno superfluido (parte derecha de la misma) tomando como referencia el modelo *pairing plus quadropole* [58]. Este modelo incluye de la forma más simple posible los aspectos fundamentales de las teorías de campo medio para sistemas nucleares de muchos cuerpos. El potencial promedio esférico promedio es aproximado mediante un potencial de oscilador armónico esférico. La interacción residual deberá contener dos partes. La primera contribuirá al campo  $\Gamma$  y dará cuenta de las deformaciones más allá de la simetría esférica. La otra, contribuirá al campo de apareamiento  $\Delta$ . Ambas partes de la interacción se eligen de tal forma que el potencial residual resultante sea separable.

Aspecto	S. Rotacional	S. N° Partículas
Tipo de correlaciones que incluyen	Cuadrupolares	De apareamiento
Existe un mínimo en la superficie de energía	Deformado	Superfluido
Operadores	$\hat{Q}_\mu = \sum_{kk'} \langle k   r^2 Y_{2\mu}   k' \rangle c_k^\dagger c_{k'}$	$\hat{\Delta} = G \sum_{k>0} c_{\bar{k}} c_k$
En la aprox. de campo medio violan	$[\hat{H}, \hat{J}] = 0$	$[\hat{H}, \hat{N}] = 0$
Aprox. de Cranking	$H - \omega \hat{J}_x$	$H - \lambda \hat{N}$
La solución $ \Phi\rangle$ está caracterizada por la orientación dada por los ángulos	Euler: $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$	Gauge: $\varphi$
Las soluciones están degeneradas con respecto a rotaciones	$R(\Omega) = e^{-i\alpha \hat{J}_z} e^{-i\beta \hat{J}_y} e^{-i\gamma \hat{J}_z}$	$G(\varphi) = e^{i\varphi \hat{N}/2}$
Proyectores	$P_{MM'}^J \propto \int D_{MM'}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) d\Omega$	$P^N \propto \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} d\varphi$
En el estado deformado, se dan el espectro de excitación	Vibraciones $\beta, \gamma$ . Rotaciones ( $J \neq 0$ )	Vibraciones y rotaciones de apareamiento.

**Tabla 3.1:** Comparación entre la simetría rotacional y la simetría del número de partículas.

Una vez descritas las consideraciones generales sobre simetrías y su ruptura dentro de la aproximación de campo medio, pasamos ahora a explicar los métodos de proyección que nos van a permitir restaurar dichas simetrías rotas (sección 3.4).

### 3.4. Restauración de simetrías. Métodos de Proyección

Hemos visto que las funciones de onda tipo HFB, si bien son capaces de incluir correlaciones entre las partículas, no eran autoestado de los operadores de simetría. Sin embargo, por las propiedades de la interacción nuclear el hamiltoniano de muchos cuerpos, es invariante bajo un número de operadores de simetría. Esto es, el hamiltoniano conmuta con el correspondiente operador de simetría  $S$ :

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0. \quad (3.45)$$

De modo que las funciones de onda exactas sí que deben ser autoestados simultáneamente del hamiltoniano y de los operadores asociados a las simetrías. Por lo tanto, como ya se mencionó en la sección anterior, para obtener una descripción mejor del núcleo así como para obtener valores de diferentes observables en el sistema de laboratorio es necesario el uso de métodos más allá del campo medio para restaurar las simetrías rotas.

Para restaurar las simetrías vamos a utilizar los llamados métodos de proyección, en los que las funciones de onda de campo medio se proyectan sobre el subespacio de autofunciones de  $\hat{S}$  mediante la aplicación del operador  $P^S$ :

$$P^S|\Phi\rangle = |\Psi^S\rangle, \quad (3.46)$$

donde  $P^S$  es el proyector con el valor  $S$  bien definido y  $|\Psi^S\rangle$  es la nueva función de onda, que sí es autoestado de  $\hat{S}$ .

Desde el punto de vista variacional, esto es, si el problema variacional es resuelto antes o después de la proyección, vamos a distinguir entre dos tipos de proyección:

- Proyección después de la variación (projection after variation, PAV):  
Se determinan las funciones de onda resolviendo las ecuaciones de HFB

constreñidas <sup>2</sup>. Para ello, se minimiza la expresión:

$$\delta E_{\text{HFB}}(\vec{q}) = \delta \left( \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} - \lambda_N \hat{N} - \lambda_Z \hat{Z} - \lambda_{\vec{q}} \hat{Q} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} \right)_{|\Phi(\vec{q})\rangle = |\text{HFB}(\vec{q})\rangle} = 0. \quad (3.47)$$

Una vez obtenida la solución a la ecuación anterior se realiza la proyección y se obtienen las superficies de energía proyectadas:

$$E_{PAV}^S(\vec{q}) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(\vec{q}) | (P^S)^\dagger \hat{H} P^S | \Phi_{\text{HFB}}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(\vec{q}) | (P^S)^\dagger P^S | \Phi_{\text{HFB}}(\vec{q}) \rangle} \quad (3.48)$$

- Variación después de la proyección (variation after projection, VAP): Otra posibilidad, es llevar a cabo una proyección VAP [56, 71, 72]. En este caso se van a proyectar primero las funciones de onda  $|\Phi^S(\vec{q})\rangle$ . Éstas son usadas como espacio variacional y se minimiza la energía proyectada:

$$P^S |\Phi(\vec{q})\rangle = P^S |\text{VAP}(\vec{q})\rangle = |\Phi^S(\vec{q})\rangle \quad (3.49)$$

$$\delta E_{\text{VAP}}^S(\vec{q}) = \delta \left( \frac{\langle \Phi^S(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^S(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^S(\vec{q}) | \Phi^S(\vec{q}) \rangle} - \lambda_{\vec{q}} \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{Q} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle} \right)_{|\Phi(\vec{q})\rangle = |\text{VAP}(\vec{q})\rangle} = 0 \quad (3.50)$$

Con las funciones de onda halladas, definimos superficies de energía potencial VAP:

$$E_{\text{VAP}}^S(\vec{q}) = \frac{\langle \Phi_{\text{VAP}}(\vec{q}) | (P^S)^\dagger \hat{H} P^S | \Phi_{\text{VAP}}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi_{\text{VAP}}(\vec{q}) | (P^S)^\dagger P^S | \Phi_{\text{VAP}}(\vec{q}) \rangle} \quad (3.51)$$

Si el proyector utilizado es el del número de partículas (3.52), estaremos en un caso PN-VAP (particle number variation after projection), en el que las funciones de onda intrínsecas serán de este tipo en lugar de las vistas con anterioridad y que eran de tipo HFB.

El método VAP ofrece una solución mejor dado que el funcional que se minimiza al incluir las simetrías se parece más a la energía exacta del sistema. El precio a pagar es un mayor coste computacional, pues hay que evaluar la energía proyectada a cada paso que damos hasta obtener la convergencia en

<sup>2</sup>Donde expresamos con  $\vec{q}$  el conjunto de ligaduras que se va a contemplar. Obtendremos la energía como función paramétrica de las ligaduras



lugar de proyectar una sola vez. Además, la energía proyectada es más sensible a la aparición de divergencias [53–56, 73] por ello se requiere la inclusión de todos los términos de la interacción.

En este trabajo se han utilizado dos proyecciones; la proyección a buen número de partículas para restaurar la simetría rota con el mismo nombre, y la proyección a buen momento angular para restaurar la simetría de invariancia bajo rotaciones.

### 3.4.1. Proyección a buen número de partículas

Tal y como se ha descrito en la sección anterior, es posible construir a partir de funciones de onda de campo medio una función de onda que sea autoestado del número de partículas proyectando al subespacio de funciones de onda con el número de partículas correcto [58] (particle number projection, PNP). En este caso el proyectador viene dado por:

$$P^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} d\varphi, \quad (3.52)$$

donde  $\varphi$  es la variable canónica conjugada de  $\hat{N}$  en el espacio gauge asociado. O bien, puede ser escrito en notación de Dirac:

$$P^N = \sum_{\alpha} |\alpha N\rangle \langle \alpha N|, \quad (3.53)$$

donde  $|\alpha N\rangle$  es un conjunto completo de funciones de onda ortogonales con número de partículas igual a  $N$  y caracterizadas cuánticamente por  $\alpha$ . El proyectador  $P^N$  cumple las siguientes propiedades:

$$(P^N)^\dagger = P^N \quad (3.54)$$

$$(P^N)^2 = P^N \quad (3.55)$$

Si desarrollamos un estado de HFB ( $|\Phi\rangle$ ) en la base de autoestados de  $\hat{N}$  y aplicamos el operador proyección que acabamos de describir podemos construir un autoestado de  $\hat{N}$ :

$$|\Phi\rangle = \sum_{\alpha k} A_{\alpha k} |\alpha N_k\rangle \quad (3.56)$$

Donde se cumple:

$$\hat{N} |\alpha N_k\rangle = N_k |\alpha N_k\rangle \quad (3.57)$$

Proyectamos ahora:

$$\begin{aligned} P^N |\Phi\rangle &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(\hat{N}-N)} |\Phi\rangle d\varphi = \sum_{\alpha k} \frac{A_{\alpha k}}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{-i\varphi N} e^{i\varphi \hat{N}} |\alpha N_k\rangle d\varphi = \\ &= \sum_{\alpha k} A_{\alpha N_k} |\alpha N_k\rangle \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N_k-N)} d\varphi, \end{aligned} \quad (3.58)$$

donde:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N_k-N)} d\varphi = \delta_{N_k N}. \quad (3.59)$$

De modo que al final se obtiene:

$$P^N |\Phi\rangle = \sum_{\alpha} A_{\alpha N} |\alpha N\rangle = |\Phi^N\rangle \quad (3.60)$$

y

$$\hat{N} |\Phi^N\rangle = \sum_{\alpha} A_{\alpha N} \hat{N} |\alpha N\rangle = N |\Phi^N\rangle. \quad (3.61)$$

Es usual la representación del proyector a buen número de partículas en la forma discreta dada por Fomenko [74], en lugar de en la forma integral dada por (3.52).

$$P_L^N = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L e^{i\varphi_l(\hat{N}-N)}; \quad \varphi_l = \frac{\pi}{L} l \quad (3.62)$$

Nos estamos refiriendo a un proyector general  $P^N$  que actúa sobre  $N$  partículas. Sin embargo, aunque se haga como simplificación, hay que tener en cuenta que las funciones de onda de un núcleo atómico tenemos dos tipos de fermiones, protones y neutrones, por lo que nuestra función de onda proyectada será de la forma:

$$|\Phi^{NZ}(\vec{q})\rangle = P^N P^Z |\Phi(\vec{q})\rangle \quad (3.63)$$

Estamos interesados en obtener el valor esperado del hamiltoniano con funciones de onda proyectadas a buen número de partículas [69]. En función

del tipo de proyección que se haga, tendremos un caso HFB+PNP (si la proyección es PAV) ó PN-VAP (si la proyección es VAP). La energía vendrá dada por la expresión:

$$E^{NZ}(\vec{q}) = \frac{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle} = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle} \quad (3.64)$$

Si desarrollamos los proyectores que aparecen en la ecuación anterior obtenemos para el numerador:

$$\begin{aligned} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle &= \frac{1}{L} \sum_{L_N=1}^L \frac{1}{L} \sum_{L_Z=1}^L e^{-i\varphi_{L_N} N} e^{-i\varphi_{L_Z} Z} \\ &\frac{\langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{L_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{L_Z} \hat{Z}} | \hat{H} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{L_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{L_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{L_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{L_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \end{aligned} \quad (3.65)$$

Lo mismo aplicado en el denominador, que se corresponde con la norma queda:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle = \frac{1}{L} \sum_{L_N=1}^L \frac{1}{L} \sum_{L_Z=1}^L e^{-i\varphi_{L_N} N} e^{-i\varphi_{L_Z} Z} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{L_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{L_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \quad (3.66)$$

Las funciones de onda de HFB que estamos utilizando, por la simetría de la tercera componente de isospín, se pueden escribir como un producto de protones y neutrones:

$$|\Phi(\vec{q})\rangle = |\Phi_N(\vec{q})\rangle |\Phi_Z(\vec{q})\rangle. \quad (3.67)$$

Por lo que con esta factorización la norma queda:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle = n^Z(\vec{q}) n^N(\vec{q}), \quad (3.68)$$

siendo cada una de ellas,  $n^\tau(\vec{q})$ :

$$n^\tau(\vec{q}) = \frac{1}{L} \sum_{l_\tau=1}^L e^{-i\varphi_{l_\tau} N_\tau} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi(\vec{q}) \rangle, \quad (3.69)$$

donde

$$\langle \Phi(\vec{q}) | e^{i\varphi_{l_\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi(\vec{q}) \rangle, \quad (3.70)$$

es calculada mediante la fórmula de Onishi [75]:

$$n(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = \left( e^{-i\varphi_{l_\tau} T r(1)} \det[T_{22}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau})] \right)^{\frac{1}{2}} \quad (3.71)$$

En esta expresión se ha introducido:

$$T_{22}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = e^{i\varphi_{l_\tau}} V^T(\vec{q}) V^*(\vec{q}) + e^{-i\varphi_{l_\tau}} U^T(\vec{q}) U^*(\vec{q}) \quad (3.72)$$

Las matrices  $V(\vec{q})$ ,  $U(\vec{q})$  son las correspondientes a la transformación de HFB definidas en la ecuación (3.6).

El numerador, lo desarrollamos de manera análoga a la explicada al principio de este capítulo, en la que obteníamos la energía de HFB y definíamos los campos de Hartree-Fock y de apareamiento, obtenemos en este caso en función del ángulo gauge:

$$H^{N_\tau}(\varphi_{\vec{q}, l_\tau}) = Tr \left( t\rho(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) + \frac{1}{2} \Gamma^{10}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \rho(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) - \frac{1}{2} \Delta^{10}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \kappa^{01}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \right) \quad (3.73)$$

La energía de apareamiento queda ahora definida como:

$$E_{\text{pair}}(\varphi_{\vec{q}, l_\tau}) = Tr \left( -\frac{1}{2} \Delta^{10}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \kappa^{01}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \right) \quad (3.74)$$

Se ha definido la matriz densidad el tensor de apareamiento y los campos de Hartree-Fock y apareamiento en función de dicho ángulo<sup>3</sup> como:

$$\rho_{ll'}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = (e^{i\varphi_{l_\tau}} V^*(\vec{q}) T_{22}^{-1}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) V^T(\vec{q}))_{ll'} \quad (3.75)$$

$$\kappa^{10}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = (e^{i\varphi_{l_\tau}} V^*(\vec{q}) T_{22}^{-1}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) U^T(\vec{q}))_{ll'} \quad (3.76)$$

$$\kappa^{01}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = - (e^{-i\varphi_{l_\tau}} U^*(\vec{q}) T_{22}^{-1}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) V^T(\vec{q}))_{ll'} \quad (3.77)$$

$$\Gamma_{ll'}^{10}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = \sum_{kk'} \bar{v}_{lkl'k'} \rho_{k'k}^{10, \tau}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \quad (3.78)$$

$$\Delta^{10}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \bar{v}_{lkl'k'} \kappa_{k'k}^{10, \tau}(\vec{q}, \varphi_{l_\tau}) \quad (3.79)$$

---

<sup>3</sup>En el apéndice D se puede ver un desarrollo análogo a este con más detalle

### 3.4.2. Proyección a buen momento angular

En esta sección nos vamos a encargar de la invariancia bajo rotaciones que ha sido rota por el método de HFB, implementando una proyección a momento angular (angular momentum projection, AMP). El proyector nos va a dar, en este caso, funciones de onda que van a ser autoestados de los operadores de momento angular  $\hat{J}^2$  y  $\hat{J}_z$ . Viene definido como [58, 76]:

$$P^{JM} = \sum_{M'} a_{M'}^J P_{MM'}^J \quad (3.80)$$

$$P_{MM'}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{MM'}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) d\Omega, \quad (3.81)$$

siendo:  $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$  los ángulos de Euler;  $D_{MM'}^J(\Omega)$  las matrices de Wigner y  $\hat{R}$  el operador unitario de rotación.

En la notación de Dirac el operador se expresa:

$$P_{MK}^J = |JM\rangle \langle JK|. \quad (3.82)$$

Este operador tiene las siguientes propiedades:

$$(P_{MK}^J)^\dagger = P_{KM}^J, \quad (3.83)$$

$$P_{M_1 K_1}^{J_1} P_{M_2 K_2}^{J_2} = \delta_{J_1 J_2} \delta_{K_1 M_2} P_{M_1 K_2}^{J_1}. \quad (3.84)$$

Además, se cumple que [77]:

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\alpha \hat{J}_z} e^{-i\beta \hat{J}_y} e^{-i\gamma \hat{J}_z} \quad (3.85)$$

$$\hat{R}(\Omega) |JM\rangle = \sum_{M'} D_{MM'}^{J*}(\Omega) |JM'\rangle \quad (3.86)$$

$$D_{MM'}^J(\Omega) = \langle JM' | \hat{R}(\Omega) | JM \rangle = e^{-iM'\alpha} d_{MM'}^J(\beta) e^{-iM\gamma}, \quad (3.87)$$

siendo  $d_{MM''}^J(\beta)$  las matrices reducidas de Wigner

En este trabajo, nos restringiremos al caso axial. Una función axialmente simétrica con autovalor  $K = 0$  cumple que:

$$\hat{J}_z |\Phi\rangle = K |\Phi\rangle = 0 \rightarrow e^{-i\gamma \hat{J}_z} |\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad (3.88)$$

Además se considerarán las simetrías autoconsistentes de paridad y simplex:

$$\hat{\Pi}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad (3.89)$$

$$\hat{\Pi}e^{-i\pi\hat{J}_x}|\Phi\rangle = |\Phi\rangle \quad (3.90)$$

Al igual que en el caso del operador a buen número de partículas, comprobamos que la función de onda proyectada es autoestado de los operadores de momento angular  $\{\hat{J}^2, \hat{J}_z\}$ . Si desarrollamos la función de onda ( $|\Phi\rangle$ ) en la base de autoestados del momento angular total y de la tercera componente del mismo:

$$|\Phi\rangle = \sum_{\alpha J' M'} A_{\alpha J' M'} |\alpha J' M'\rangle \quad (3.91)$$

Aplicamos el proyector:

$$\begin{aligned} P^{JM}|\Phi\rangle &= \sum_{K\alpha J' M'} a_K^J A_{\alpha J' M'} \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) |\alpha J' M'\rangle d\Omega \\ &= \sum_{K\alpha J' M' M''} a_K^J A_{\alpha J' M'} \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{MK}^{J*}(\Omega) D_{M'' M'}^{J'}(\Omega) |\alpha J' M''\rangle d\Omega \end{aligned} \quad (3.92)$$

En la expresión anterior, hemos sustituido  $\hat{R}(\Omega)$  por su expresión (3.86) y empleamos ahora que las matrices de Wigner cumplen la siguiente propiedad:

$$\int D_{M_1 M'_1}^{J_1*}(\Omega) D_{M_2 M'_2}^{J_2}(\Omega) d\Omega = \frac{8\pi^2}{2J+1} \delta_{J_1 J_2} \delta_{M_1 M_2} \delta_{M'_1 M'_2}. \quad (3.93)$$

Con lo que obtenemos:

$$P^{JM}|\Phi\rangle = \sum_{K\alpha J' M' M''} a_K^J A_{\alpha J' M'} \frac{2J+1}{8\pi^2} \frac{8\pi^2}{2J+1} \delta_{J J'} \delta_{M M'} \delta_{K M''} |\alpha J' M''\rangle$$

Finalmente obtenemos lo que queríamos demostrar:

$$P^{JM}|\Phi\rangle = \sum_{K\alpha} a_K^J A_{\alpha JK} |\alpha JM\rangle = |\alpha JM\rangle |\Phi^{JM}\rangle \quad (3.94)$$

El estado  $|\Phi\rangle$  va a ser el estado en el sistema de referencia intrínseco dado por el campo medio, mientras que  $|\Phi^{JM}\rangle$  va a ser el estado correspondiente en el sistema de laboratorio. Éste se obtiene a partir del primero construyendo

$2J + 1$  estados con buen momento angular total mediante la suma de todas las posibles rotaciones del estado intrínseco pesadas por las funciones de Wigner y para obtener el estado final, se toma la combinación lineal de todas las proyecciones sobre el eje Z del sistema intrínseco con sus correspondientes pesos, (3.81 y 3.95).

Si escribimos las funciones de onda como:

$$|\Phi^{JM}\rangle = \sum_K g_K^J P_{MK}^J |\Phi\rangle, \quad (3.95)$$

la expresión para el valor esperado de un operador escalar bajo rotaciones entre estados proyectados será:

$$\langle \hat{O}^J \rangle = \frac{\langle \Phi^{JM}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{JM}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{JM}(\vec{q}) | \Phi^{JM}(\vec{q}) \rangle} = \frac{\sum_{KK'} g_K^{J*} g_{K'}^J \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} P_{KK'}^J | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\sum_{KK'} g_K^{J*} g_{K'}^J \langle \Phi(\vec{q}) | P_{KK'}^J | \Phi(\vec{q}) \rangle} \quad (3.96)$$

$$= \frac{\sum_{KK'} g_K^{J*} g_{K'}^J O_{KK'}^J}{\sum_{KK'} g_K^{J*} g_{K'}^J \eta_{KK'}^J}, \quad (3.97)$$

donde se define  $O_{KK'}^J$  y  $\eta_{KK'}^J$  como:

$$O_{KK'}^J = \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} P_{KK'}^J | \Phi(\vec{q}) \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} \hat{R}(\Omega) | \Phi(\vec{q}) \rangle d\Omega \quad (3.98)$$

$$\eta_{KK'}^J = \langle \Phi(\vec{q}) | P_{KK'}^J | \Phi(\vec{q}) \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) | \Phi(\vec{q}) \rangle d\Omega. \quad (3.99)$$

Tendremos que calcular los solapes del operador  $\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} \hat{R}(\Omega) | \Phi(\vec{q}) \rangle$  y de la norma  $\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) | \Phi(\vec{q}) \rangle$ .

Si asumimos que tenemos funciones axialmente simétricas con  $K = 0$ , veamos lo que se obtiene para el solape del operador de la expresión (3.96) (nótese que el desarrollo del solape de la norma será análogo):

$$\langle \Phi^{JM}(\vec{q}) | \hat{O} \Phi^{JM}(\vec{q}) \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{KK'}^{J*} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} e^{-i\hat{J}_z\alpha} e^{-i\hat{J}_y\beta} e^{-i\hat{J}_z\gamma} | \Phi(\vec{q}) \rangle d\Omega \quad (3.100)$$

Considerando las identidades:

$$e^{-i\beta\hat{J}_y} = e^{i\frac{\pi}{2}\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_x} e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{J}_z}, \quad (3.101)$$

y

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \sin\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma, \quad (3.102)$$

la integral de la expresión anterior nos queda:

$$\langle \Phi^{JM}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{JM}(\vec{q}) \rangle = \frac{2J+1}{2} \int_0^\pi \text{sen}\beta d_{00}^{J*}(\beta) o(\vec{q}, \beta) d\beta. \quad (3.103)$$

Donde, para simplificar, se ha llamado:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} e^{-i\hat{J}_y\beta} | \Phi(\vec{q}) \rangle = o(\vec{q}, \beta) \quad (3.104)$$

Por las simetrías impuestas (3.88, 3.89, 3.90) es posible reducir el intervalo de integración de  $\beta$  a la mitad, esto es,  $[0, \frac{\pi}{2}]$ .

Además se ha utilizado las propiedad:

$$d_{00}^J(\pi - \beta) = (-1)^J d_{00}^J(\beta), \quad (3.105)$$

Considerando todas estas propiedades, se puede demostrar que las integrales sólo van a ser distintas de cero en el caso en el que el momento angular sea par [78].

Finalmente, el valor esperado de un operador  $\hat{O}$  vendrá dado por la expresión.

$$\begin{aligned} \langle \Phi^{JM}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{JM}(\vec{q}) \rangle &= (2J+1) \int_0^{\pi/2} \frac{1}{2} (1 + (-1)^J \hat{\Pi}) d_{00}^{J*}(\beta) \text{sen}\beta o(\vec{q}, \beta) d\beta = \\ &= (2J+1) \int_0^{\pi/2} d_{00}^{J*}(\beta) \text{sen}\beta o(\vec{q}, \beta) d\beta. \end{aligned} \quad (3.106)$$

En esta expresión observamos que la energía sólo va a estar bien definida en el caso en el que el momento angular sea par.

Al igual que se ha hecho en el análisis de la proyección al número de partículas se puede particularizar dicho operador como el hamiltoniano y desarrollar el cálculo de los solapes como se explicó en dicho apartado. Este cálculo se puede ver en el apéndice D, donde se hace parte de este desarrollo.

### 3.4.3. Divergencias y término dependiente de la densidad

La expresión de la energía proyectada puede contener divergencias [56] que aparecen en la matriz densidad y en el tensor de apareamiento. Su procedencia viene de dos fuentes:

Por un lado es necesario considerar todas y cada una de las contribuciones de la interacción a los campos de HF ( $\Gamma$ ) y apareamiento ( $\Delta$ ). Esto es importante ya que normalmente se suelen despreciar algunos términos de intercambio (Fock). Además, es necesario tener la misma interacción en los canales de HF



y apareamiento para que se produzca la cancelación de estas divergencias. La segunda fuente tiene su origen en el término dependiente de la densidad de la interacción, estudiada ampliamente [54, 56, 79, 80]. La fuerza de Gogny (2.1) incluye un término dependiente de la densidad, que tiene la forma:

$$V_{DD} = t_3 \left( 1 + x_0 \hat{P}^\sigma \right) \delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \rho^\alpha \left( \frac{r_1 + r_2}{2} \right), \quad (3.107)$$

con  $\alpha = 1/3$  y  $x_0 = 1$ . En teorías de campo medio, está claro qué densidad debemos emplear en el término (3.107). Sin embargo, en teorías proyectadas y, en general, en teorías más allá del campo medio, tendremos que tomar una prescripción de dicha densidad.

La contribución del término dependiente de la densidad a la energía proyectada vendrá dado por:

$$E_{DD}^P = \frac{\langle \Phi^N | \hat{V}_{DD} [\bar{\rho}(\vec{r})] | \Phi^N \rangle}{\langle \Phi^N | \Phi^N \rangle} = \frac{\int d\varphi \langle \phi | \hat{V}_{DD} [\bar{\rho}(\vec{r})] e^{i\varphi \hat{N}} | \phi \rangle}{\int d\varphi \langle \phi | e^{i\varphi \hat{N}} | \phi \rangle}, \quad (3.108)$$

donde  $[\bar{\rho}(\vec{r})]$  indica la dependencia de  $V_{DD}$  con la densidad  $\bar{\rho}(\vec{r})$ . La densidad depende de los estados con los que se calcula, de modo que a nivel de campo medio solo aparecen elementos diagonales, por lo que la densidad espacial va a estar determinada de forma unívoca, mientras que para los otros casos tendremos que encontrar una prescripción que cumpla ciertas condiciones. Las más importantes son la que la energía sea una magnitud escalar y real.

Se tienen dos prescripciones diferentes [81, 82] para la densidad; proyectada o mixta.

a) Prescripción 1: **Densidad proyectada.**

Es la que se utiliza en el caso de proyección al número de partículas donde se proyecta en el espacio gauge asociado al número de partículas y no hay ninguna dependencia en las coordenadas espaciales. Esta elección está justificada si partimos del hecho de que en la aproximación a campo medio la energía viene dada por:

$$E = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle}, \quad (3.109)$$

y se asume que  $V_{DD}$  depende de la densidad:  $\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{\rho} | \Phi(\vec{q}) \rangle / \langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle$ . Sin embargo, si la función de onda que describe el sistema nuclear es la función

de onda proyectada  $|\Phi^{Z,N}\rangle$ , el elemento de matriz que tenemos que calcular en la expresión (3.108) es de la forma:

$$\frac{\langle \Phi^{Z,N}(\vec{q}) | \hat{V}_{DD} | \Phi^{Z,N}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{Z,N}(\vec{q}) | \Phi^{Z,N}(\vec{q}) \rangle}. \quad (3.110)$$

Por tanto, parece razonable utilizar en  $V_{DD}$  la densidad proyectada. Se define como:

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = \rho^{Z,N}(\vec{r}) = \frac{\langle \Phi^{Z,N}(\vec{q}) | \hat{\rho} | \Phi^{Z,N}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{Z,N}(\vec{q}) | \Phi^{Z,N}(\vec{q}) \rangle} = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{\rho} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle}. \quad (3.111)$$

Con el operador densidad definido como:

$$\hat{\rho}(\vec{r}) = \sum_{i=1}^A \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \quad (3.112)$$

b) Prescripción 2: **Densidad mixta.**

En el caso de restaurar simetrías de tipo espacial, simetrías asociadas a  $\vec{r}$  como la proyección al momento angular a la paridad, esta es la prescripción que debe ser considerada. En este caso, se parte del hecho de que para evaluar la expresión (3.108) hay que calcular elementos de matriz entre funciones de onda producto diferentes,  $|\Phi\rangle$  y  $|\Phi'\rangle$ , relacionadas por:

$$|\Phi'\rangle = e^{i\varphi\hat{N}} |\Phi\rangle \quad (3.113)$$

De modo que para calcular elementos de matriz de la forma:

$$\frac{\langle \Phi | \hat{V}_{DD} | \Phi' \rangle}{\langle \Phi | \Phi' \rangle}, \quad (3.114)$$

elegimos la densidad ( $\rho_\varphi(\vec{r})$ ) la densidad mixta como:

$$\bar{\rho}(\vec{r}) = \rho_\varphi(\vec{r}) = \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{\rho} | \Phi'(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi'(\vec{q}) \rangle}, \quad (3.115)$$

para ser usada en  $\hat{V}_{DD}$ . Esta aproximación es conocida como prescripción de la densidad mixta.

Con respecto al momento angular cabe decir que como ya se vio en la sección anterior el hamiltoniano es invariante bajo rotaciones y, por tanto, la

energía intrínseca es independiente de la orientación de la función de onda intrínseca, esto es:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi(\vec{q}) \rangle = \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{R}^\dagger(\Omega) \hat{H} \hat{R}(\Omega) | \Phi(\vec{q}) \rangle \quad (3.116)$$

Sin embargo, para la interacción que estamos usando, el término dependiente de la densidad, en general, no va a conmutar con el operador de rotaciones. Se puede demostrar [78], que con la prescripción de la densidad espacial apropiada, el término dependiente de la densidad se va a poder expresar como:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^J(\vec{q}) &= \langle \Phi(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger \hat{V}_{DD} P^{JM} | \Phi(\vec{q}) \rangle = \\ &= \sum_{KK'} g_K^{J*} g_K^J \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{KK'}^{J*} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{V}_{DD} \hat{R}(\Omega) | \Phi(\vec{q}) \rangle d\Omega \end{aligned} \quad (3.117)$$

El término dependiente de la densidad debe cumplir como requisito, además de que la energía sea real, que no transporte momento angular [83], es decir:

$$\begin{aligned} &\frac{\langle \Phi^{J_1, M_1, Z, N}(\vec{q}) | \hat{H}(\rho) | \Phi^{J_2, M_2, Z, N}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{J_1, M_1, Z, N}(\vec{q}) | \Phi^{J_2, M_2, Z, N}(\vec{q}) \rangle} \\ &= \delta_{J_1 J_2} \delta_{M_1 M_2} \frac{\langle \Phi^{J_1, M_1, Z, N}(\vec{q}) | \hat{H}(\rho) | \Phi^{J_1, M_1, Z, N}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{J_1, M_1, Z, N}(\vec{q}) | \Phi^{J_1, M_1, Z, N}(\vec{q}) \rangle} \end{aligned} \quad (3.118)$$

La prescripción mixta para el momento angular tiene la forma:

$$\rho_{\vec{q}}^{Z, N}(\vec{r}, \Omega, \Omega') = \frac{\langle \Phi^{Z, N}(\vec{q}) | \hat{R}^\dagger(\Omega) \hat{\rho} \hat{R}(\Omega') | \Phi^{Z, N}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{Z, N}(\vec{q}) | \hat{R}^\dagger(\Omega) \hat{R}(\Omega') | \Phi^{Z, N}(\vec{q}) \rangle} \quad (3.119)$$

Para concluir; para evitar las divergencias en nuestros cálculos se ha tenido en cuenta:

- Todos los términos de intercambio de la fuerza de Gogny han sido incluidos.
- Para el término dependiente de la densidad se toma la densidad proyectada en el caso de la proyección al número de partículas, ya que esta prescripción no presenta divergencias [56] mientras que la prescripción mixta si puede presentar problemas.
- La prescripción de la densidad mixta es la que se ha utilizado para el caso de la proyección al momento angular [78] y en el método de la coordenda generadora [84].

### 3.4.4. Proyección simultánea a $N$ y $J$

Tratamos ahora el caso en el que se restauren de forma simultánea las dos simetrías estudiadas anteriormente (particle number angular momentum projection, PNAMP). De modo que las expresiones anteriores de las subsecciones 3.4.1 y 3.4.2 deben ser generalizadas. Para facilitar su lectura, varios de los desarrollos teóricos han sido recogidos en forma de apéndice D.

En este caso, si se restauran la simetría del número de partículas y la simetría de invariancia rotacional, las funciones de onda tendrán ahora la forma:

$$P^{JM} P^N P^Z |\Phi(\vec{q})\rangle = |\Phi^{NZJM}(\vec{q})\rangle \quad (3.120)$$

La energía proyectada está definida por la expresión:

$$E^{NZJ}(\vec{q}) = \frac{\langle \Phi^{NZJM}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZJM}(\vec{q}) \rangle}{\langle \Phi^{NZJM}(\vec{q}) | \Phi^{NZJM}(\vec{q}) \rangle} \quad (3.121)$$

Desarrollamos el numerador (hamiltoniano) y el denominador (norma) de la expresión para la energía proyectada:

Para la norma se obtiene:

$$\begin{aligned} N^{NZJ}(\vec{q}) &= \langle \Phi^{NZJM}(\vec{q}) | \Phi^{NZJM}(\vec{q}) \rangle = \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle \\ &= \sum_{KK'} g_K^{J*} g_K^J \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle d\Omega, \end{aligned} \quad (3.122)$$

donde:

$$\langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle = n^N(\vec{q}, \Omega) n^Z(\vec{q}, \Omega). \quad (3.123)$$

Como ya se vió en la expresión (3.69):

$$n^\tau(\vec{q}, \Omega) = \frac{1}{L} \sum_{\varphi_{l\tau}=1}^L e^{-i\varphi_{l\tau} N_\tau} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_{l\tau} \hat{N}_\tau} | \Phi(\vec{q}) \rangle \quad (3.124)$$

La expresión general de hamiltoniano es:

$$\begin{aligned} H^{NZJ}(\vec{q}) &= \langle \Phi^{NZJM}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZJM}(\vec{q}) \rangle = \langle \Phi^{NZ}(\vec{q}) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} | \Phi^{NZ}(\vec{q}) \rangle \\ &= \sum_{KK'} g_K^{J*} g_K^J \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{KK'}^{J*}(\Omega) \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle d\Omega \end{aligned} \quad (3.125)$$

Sin embargo, como se ha visto más arriba, estas expresiones se reducen considerablemente cuando se imponen las simetrías que estamos considerando (3.88, 3.89, 3.90). Tendremos que evaluar el solape proyectado que aparece en las integrales:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle = \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}) \rangle \quad (3.126)$$

Si seguimos lo que se hizo de manera particular para cada operador en (3.65) y (3.103), finalmente llegamos a la expresión de la energía proyectada para funciones axialmente simétricas:

$$E^{NZJ}(\vec{q}) = \frac{\int_0^{\pi/2} \text{sen} \beta d_{00}^{J*}(\beta) e^{NZ}(\vec{q}, \beta) n^{NZ}(\vec{q}, \beta) d\beta}{\int_0^{\pi/2} \text{sen} \beta d_{00}^{J*}(\beta) n^{NZ}(\vec{q}, \beta) d\beta} \quad (3.127)$$

Teniendo en cuenta que las funciones de onda son simétricas bajo simplex, las expresiones de la norma  $n^{NZ}(\vec{q}, \beta)$  y de la energía  $e^{NZ}(\vec{q}, \beta)$ , se pueden escribir en función de  $J_x$  en lugar de  $J_y$  y quedan definidas como:

$$n^{NZ}(\vec{q}, \beta) = \frac{1}{L^2} \sum_{l_N} \sum_{l_Z} e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \quad (3.128)$$

$$e^{NZ}(\vec{q}, \beta) = \frac{1}{L^2} \sum_{l_N} \sum_{l_Z} e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{H} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}) \rangle \quad (3.129)$$

### 3.5. Método de la coordenada generadora

El estudio de la restauración de las simetrías, mostrado en la sección anterior, se completará con la implementación de la mezcla de configuraciones. Es posible ir un paso adelante en el marco de teorías más allá del campo medio y conseguir funciones de onda que incluyan más correlaciones. Para ello, se usa el Método de la Coordenada Generadora (GCM), a la que está dedicada esta sección.

Se conoce como aproximación SCCM (*Symmetry Conserving Configuration Mixing*) a aquella que tiene en cuenta la conservación de simetrías junto con la mezcla de configuraciones [78, 85–87].

El método de la coordenada generadora nos permite tratar con grados de libertad colectivos de una forma sencilla. En esta aproximación la función de onda colectiva GCM se expresa como una combinación lineal de los estados de la base con diferentes valores de las coordenadas colectivas elegidas. Para

la parte de la interacción de largo alcance se toman como variables colectivas la expansión multipolar (cuadrupolar, hexadecupolar, octupolar, etc...) de los operadores de la deformación. Para la parte de corto alcance de la interacción se toma como coordenada colectiva el gap de apareamiento. Cada grado de libertad que se considere, incrementa la dificultad del cálculo, sobre todo desde el punto de vista computacional ya que se incrementa el tiempo de cálculo. Para nuestros medios técnicos el número de horas de CPU supone casi un factor 100 (97.3) entre un cálculo en el que se considera una variable colectiva frente a uno en el que se consideren dos. Por lo que sólo los grados de libertad más relevantes van a ser tenidos en cuenta. Lo más frecuente es considerar de forma explícita solo el grado de libertad asociado a la deformación cuadrupolar, ya sea en cálculos axiales o triaxiales. Sin embargo, se ha analizado extensamente que las correlaciones de apareamiento juegan un papel importante en la descripción de observables nucleares [88]. De hecho, como ya ha sido mencionado, a nivel de campo medio para tener una buena descripción debemos trabajar en el marco de la aproximación HFB [89] en el que se incluyen las correlaciones monopolares y cuadrupolares al mismo nivel. Por tanto, parece razonable tomar fluctuaciones de los valores medios de ambas variables dentro del marco de teorías más allá del campo medio (BMF).

El método GCM se basa en la mezcla de configuraciones. Consiste en construir una combinación lineal de muchas funciones de onda de tipo producto. Las funciones de onda que van a ser mezcladas y que van a construir los estados GCM, son las que resultan de proyectar simultáneamente a buen número de partículas y buen momento angular los estados intrínsecos que se obtenían con el método de HFB o PN-VAP y que dependían de una o dos variables colectivas. Tanto la elección de la base como de las coordenadas generadoras van a ser importantes a la hora de implementar el método y obtener una mejor solución del sistema.

Se propone como solución prueba del sistema la siguiente combinación de estados:

$$|\Psi^{NZJ\sigma}\rangle = \int f^{NZJ\sigma}(\vec{q}) |\Phi^{NZJ}(\vec{q})\rangle d\vec{q}, \quad (3.130)$$

donde:

- $|\Psi^{NZJ\sigma}\rangle$  es la función de onda mezcla. El superíndice  $\sigma = 1, 2, 3, \dots$  etiqueta los distintos estados que se pueden tener para un mismo valor de momento angular, siendo  $\sigma = 1$  los estados yrast. Así, para un núcleo par-par el estado fundamental vendrá determinado por  $J = 0, \sigma = 1$ .
- $|\Phi^{NZJ}(\vec{q})\rangle$  son las funciones de onda intrínsecas HFB o VAP, proyec-

tadas simultáneamente a buen número de partículas y buen momento angular, definidas con anterioridad en la ecuación (3.120).

- $f^{NZJ}(\vec{q})$  es el peso de las funciones generadoras. Son parámetros que van a ser determinados de forma variacional resolviendo la ecuación  $\delta E(|\Psi^{NZJ}(\vec{q})\rangle) = 0$ .
- $\vec{q}$  Es el conjunto de coordenadas generadoras. En este estudio, se ha considerado un generador unidimensional y otro bidimensional, como será explicado en capítulos posteriores.

Desarrollamos ahora el método para el caso de un generador que dependa del conjunto de coordenadas  $\{\vec{q}\}$ .

La resolución de la ecuación variacional para la determinación de los pesos ( $f^{NZJ\sigma}$ ) nos conduce a una ecuación de autovalores generalizada ya que los estados en los que se hace la combinación lineal de la ecuación (3.130) no son ortonormales. Es conocida como la ecuación de Hill-Wheeler (HW) [58,90,91]:

$$\int \left( \mathcal{H}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') - E^{NZJ\sigma} \mathcal{N}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') \right) f^{NZJ\sigma}(\vec{q}') d\vec{q}' = 0, \quad (3.131)$$

donde se ha definido el solapamiento de la norma y del hamiltoniano respectivamente:

$$\mathcal{N}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') = \langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \Phi^{NZJ}(\vec{q}') \rangle, \quad (3.132)$$

$$\mathcal{H}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') = \langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \hat{H} | \Phi^{NZJ}(\vec{q}') \rangle. \quad (3.133)$$

Además, la energía se ha definido como:

$$E^{NZJ\sigma} = \frac{\int f^{NZJ\sigma*}(\vec{q}) \mathcal{H}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') f^{NZJ\sigma}(\vec{q}') d\vec{q} d\vec{q}'}{\int f^{NZJ\sigma*}(\vec{q}) \mathcal{N}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') f^{NZJ\sigma}(\vec{q}') d\vec{q} d\vec{q}'}. \quad (3.134)$$

Si el conjunto de coordenadas generadoras es discretizado en un conjunto finito de puntos, tenemos:

$$|\Psi^{NZJ\sigma}\rangle = \sum_{\vec{q}} f^{NZJ\sigma}(\vec{q}) P^J P^N P^Z |\Phi(\vec{q})\rangle, \quad (3.135)$$

la integral de la ecuación HW (3.131) acaba siendo una suma:

$$\sum_{\vec{q}'} \left( \langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \mathcal{H}^{NZJ} | \Phi^{NZJ}(\vec{q}') \rangle - E^{NZJ\sigma} \langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \Phi^{NZJ}(\vec{q}') \rangle \right) f^{NZJ\sigma}(\vec{q}') = 0. \quad (3.136)$$

Para abordar la resolución de la ecuación de HW, es necesario transformarla en un problema de autovalores normal siguiendo los siguientes pasos:

1-. Diagonalización del solapamiento de la norma:

$$\sum_{\vec{q}} \langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \Phi^{NZJ}(\vec{q}') \rangle u_k^{NZJ}(\vec{q}') = n_k^{NZJ} u_k^{NZJ}(\vec{q}). \quad (3.137)$$

2-. Construcción de una base natural, ortonormal:

Se construye a partir de los autovalores ( $n_k^{NZJ}$ ) distintos de cero y sus correspondientes autovectores, obtenidos al diagonalizar la matriz del solape de la norma en el paso anterior, los estados naturales:

$$|k^{NZJ}\rangle = \sum_{\vec{q}} \frac{u_k^{NZJ}(\vec{q})}{\sqrt{n_k^{NZJ}}} |\Phi^{NZJ}(\vec{q})\rangle, \quad (3.138)$$

con  $n_k^{NZJ} \geq \varepsilon$ . Estos estado naturales sí son ortogonales por construcción y van a servir de base en la que va a ser desarrollada la función de onda original (3.130). Debido a que las funciones de onda proyectadas  $|\Phi^{NZJ}(\vec{q})\rangle$  no son ortogonales, habrá autovalores  $n_k^{NZJ}$  de la matriz de los solapes de la norma que van a ser cero, por lo que no deben ser tenidos en cuenta en la construcción de los estados naturales. De modo que es posible estudiar la convergencia de las soluciones a medida que se incluyen estados naturales con autovalor de la norma más pequeño en el desarrollo de la función de onda (3.139).

3-. Expansión de la función de onda en la base natural:

$$|\Psi^{NZJ\sigma}\rangle = \sum_k g_k^{NZJ\sigma} |k^{NZJ}\rangle. \quad (3.139)$$

El número de estados de la base natural que son tenidos en cuenta para la expansión de la función de onda, es en cierta medida arbitrario ya que depende de hasta qué valor del autovalor de la norma correspondiente queremos usar. Si el autovalor es muy pequeño, entonces estaremos introduciendo muchos estados en la base natural y dependencia lineal en nuestra base. Si en cambio sólo tomamos unos pocos estados, no estaremos aprovechando todas las posibles correlaciones que están incluidas en el conjunto de funciones original. Debemos alcanzar un compromiso entre ambas situaciones. Se estudia la energía en función de los estados de la base natural que se tomen y cuando se alcance un valor más o menos constante de la misma (plateau) ese sería el valor definitivo. También hay que imponer la condición de ortonormalización



de los estados correspondientes a un mismo  $J$ . Si se escogen distintas bases naturales para calcular estados con el mismo momento angular pero distinto  $\sigma$ , entonces estos estados dejan de ser ortogonales (y eso no puede ser). Para distinto  $J$ , son ortogonales por construcción con lo que sí se puede coger distintas bases naturales.

4-. Resolución de la ecuación de HW en la base natural:

Siguiendo las anteriores consideraciones, es posible escribir la ecuación de HW como una ecuación de autovalores habitual.

$$\sum_{k'} \langle k^{NZJ} | \hat{H} | k'^{NZJ} \rangle g_{k'}^{NZJ\sigma} = E^{NZJ\sigma} g_k^{NZJ\sigma}. \quad (3.140)$$

Por tanto, resolviendo la ecuación (3.140) obtenemos las energías  $E^{NZJ\sigma}$  y los coeficientes  $g_k^{NZJ\sigma}$  que determinan las funciones de onda GCM.

5-. Cálculo de la función de onda colectiva:

Resolviendo la ecuación anterior se obtienen las energías  $E^{NZJ\sigma}$  y los coeficientes  $g_k^{NZJ\sigma}$  que determinan los pesos de las funciones de onda de GCM. Con estos coeficientes es posible escribir la función de onda colectiva:

$$G^{NZJ\sigma}(\vec{q}) = \sum_{\vec{q}'} [\mathcal{N}^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}')]^{1/2} \cdot f^{NZJ\sigma}(\vec{q}') = \sum_k g_k^{NZJ\sigma} u_k^{NZJ}(\vec{q}). \quad (3.141)$$

La función de onda colectiva al cuadrado está normalizada a 1 ( $\sum_q |G(q)|^2 = 1$ ) y da los pesos de cada coordenada intrínseca en la función de onda GCM.

6-. Cálculo de los valores esperados:

Resuelta la ecuación de autovalores, es posible también determinar los valores esperados de cualquier operador.

$$\langle \Psi^{NZJ\sigma} | \hat{O} | \Psi^{NZJ'\sigma'} \rangle = \sum_{kk'} g_k^{NZJ\sigma*} \langle k^{NZJ} | \hat{O} | k'^{NZJ'} \rangle g_{k'}^{NZJ'\sigma'}. \quad (3.142)$$

El elemento de matriz entre los estados de la base natural será:

$$\langle k^{NZJ} | \hat{O} | k'^{NZJ'} \rangle = \int (u_k^{NZJ}(\vec{q}))^* \langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{NZJ'}(\vec{q}') \rangle u_{k'}^{NZJ'}(\vec{q}') \frac{d\vec{q}d\vec{q}'}{\sqrt{n_k^{NZJ} n_{k'}^{NZJ'}}}. \quad (3.143)$$

Si se quieren calcular valores esperados con funciones de onda GCM proyectadas a buen número de partículas y buen momento angular, es necesario tener en cuenta que las expresiones de la sección 3.4.4 deben ser reescritas (Consultar apéndice D), pues para una proyección PNAMP los valores buscados son los elementos diagonales de la matriz a diagonalizar ahora. Esto supone que los solapes, antes calculados entre estados  $\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}) \rangle$ , ahora son entre estados  $\langle \Phi(\vec{q}) | \Phi(\vec{q}') \rangle$ .

Es importante en este punto hacer la siguiente aclaración: Cuando se restaura sólo la simetría rotacional, proyectando funciones de onda tipo HFB sólo a buen momento angular y no se incluye la proyección a buen número de partículas [78, 83, 92, 93], para que en promedio las funciones de onda tengan el número de partículas correcto se debe hacer la siguiente corrección a la ecuación de HW y a la energía proyectada [84]:

$$\sum_{\vec{q}'} \left( \langle \Phi^J(\vec{q}) | \hat{H}^{J\sigma} | \Phi^J(\vec{q}') \rangle - E^{J\sigma} \langle \Phi^J(\vec{q}) | \Phi^J(\vec{q}') \rangle \right) f^{J\sigma}(\vec{q}') = 0, \quad (3.144)$$

con

$$\begin{aligned} \langle \Phi^J(\vec{q}) | \hat{H}^{J\sigma} | \Phi^J(\vec{q}') \rangle &= \langle \Phi^J(\vec{q}) | \hat{H}^J | \Phi^J(\vec{q}') \rangle \\ &- \lambda_N \left( \langle \Phi^J(\vec{q}) | \hat{N} | \Phi^J(\vec{q}') \rangle - N \right) - \lambda_Z \left( \langle \Phi^J(\vec{q}) | \hat{Z} | \Phi^J(\vec{q}') \rangle - Z \right), \end{aligned} \quad (3.145)$$

donde  $\lambda_N$   $\lambda_Z$  son los multiplicadores de Lagrange promediados que han sido obtenidos al resolver las ecuaciones de HFB y  $N$  y  $Z$  los valores correctos del número de neutrones y protones respectivamente. No obstante, el valor esperado del número de neutrones (protones) en la función de onda GCM no es en general  $N_0$  ( $Z_0$ ). Esto se discutirá en detalle más adelante (5.2).

# Capítulo 4

## Estudio de las fluctuaciones de apareamiento en el $^{52}\text{Ti}$

### 4.1. Introducción

En este capítulo se presenta el método con el que se van obtener los resultados que serán presentados más adelante, tomando como ejemplo, el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ . Se introduce la nueva coordenada y se tratan los detalles más técnicos de los cálculos relacionados con este hecho. Además, para ilustrar como es un cálculo completo, se muestran las superficies de energía potencial y se discuten los espectros de excitación para este ejemplo.

Para los cálculos numéricos ha sido utilizada la fuerza de Gogny dependiente de la densidad y de rango finito con la parametrización D1S (capítulo 2).

Los cálculos tomando dos grados de libertad implican gran tiempo de cálculo computacional por lo que han sido restringidos a 8 capas mayores de oscilador armónico [94] y, como ya se ha mencionado, a formas axialmente simétricas. Las simetrías autoconsistentes de inversión temporal, paridad y simplex ( $e^{-i\pi\hat{J}_x}$ ) también han sido impuestas.

Se estudian tres aproximaciones diferentes que han sido explicadas en el capítulo 3 y se pueden ver, a modo de síntesis, en la tabla 4.1.

Nombre de la aproximación:	f.o intrínseca $ \phi\rangle$ calculada minimizando:	$\hat{P}$
HFB+AMP	$\langle\Phi \hat{H} \Phi\rangle/\langle\Phi \Phi\rangle$	$\hat{P}^J$
HFB+PNAMP	$\langle\Phi \hat{H} \Phi\rangle/\langle\Phi \Phi\rangle$	$\hat{P}^J\hat{P}^N$
PN-VAP+PNAMP	$\langle\Phi \hat{H}\hat{P}^N \Phi\rangle/\langle\Phi \hat{P}^N \Phi\rangle$	$\hat{P}^J\hat{P}^N$

**Tabla 4.1:** Aproximaciones utilizadas para calcular las funciones de onda  $\hat{P}|\Phi\rangle$  de la ecuación (3.130). En el nombre de la aproximación las primeras letras antes del signo de suma indican el método (HFB o PN-VAP) con el que se han calculado las funciones de onda intrínsecas. Las letras posteriores, indican las simetrías que se han restaurado (AMP o PNAMP). Las expresiones particulares para cada aproximación correspondientes al cálculo de la energía se pueden encontrar en el apéndice (C).

## 4.2. Superficies de energía potencial como función de la deformación

Es sabido que la coordenada más relevante que debe tomarse es la deformación cuadrupolar axial [17], ésta viene dada por el operador [58]:

$$\hat{Q}_{20} = \sum_{kk'} \langle k|r^2Y_{20}|k'\rangle c_k^\dagger c_{k'}, \quad (4.1)$$

siendo  $Y_{20}$  la componente del armónico esférico de orden 2. Definimos:

$$q = \langle\phi|\hat{Q}_{20}|\phi\rangle. \quad (4.2)$$

Una vez que hemos definido  $q$ , se aplica el formalismo detallado en el capítulo 3; se van a generar funciones de onda intrínsecas,  $|\phi\rangle$ , tipo HFB para valores diferentes fijados de la deformación resolviendo la ecuación variacional:

$$\delta E'[\phi(q,)] = 0, \quad (4.3)$$

con

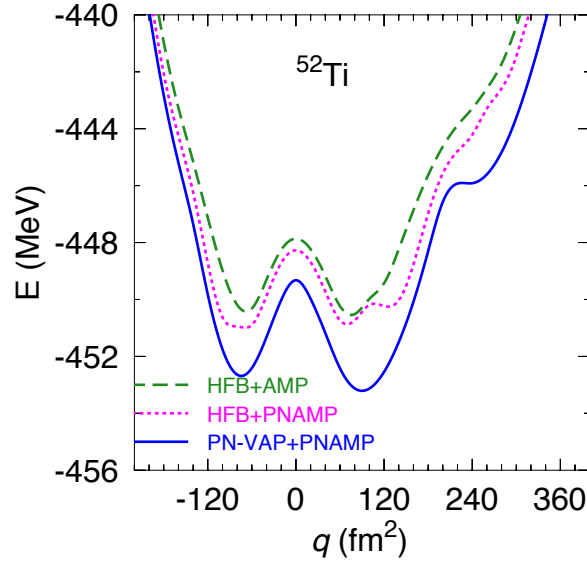
$$E' = \frac{\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} - \lambda_q \langle\phi|\hat{Q}_{20}|\phi\rangle, \quad (4.4)$$

donde  $\lambda_q$  es el correspondiente multiplicador de Lagrange para el operador definido en la ecuación (4.2) y  $\Phi$  es la función de onda proyectada. Para ilustrar los diferentes aspectos de un cálculo HFB y uno PN-VAP con diferentes

proyecciones, dentro de las tres aproximaciones dadas en la tabla anterior, se estudian las superficies de energía potencial (potential energy surfaces, PES) a lo largo de la dirección  $q$ , figura (4.1). La expresión más general para las superficies de energía potencial representadas en esta figura, será:

$$E^{1D} = \frac{\langle \Phi^{NZJ}(q) | \hat{H} | \Phi^{NZJ}(q) \rangle}{\langle \Phi^{NZJ}(q) | \Phi^{NZJ}(q) \rangle} \quad (4.5)$$

Para la variable  $q$  se ha definido un intervalo que se extiende desde los  $-220 \text{ fm}^2$  hasta los  $400 \text{ fm}^2$ , con un intervalo de  $20 \text{ fm}^2$ . De manera que tenemos 32 valores para la deformación.



**Figura 4.1:** Superficies de energía potencial en función de  $q$  para el  $^{52}\text{Ti}$  en diferentes aproximaciones (ver leyenda) y para momento angular  $J = 0$ .

La curva que se encuentra a mayor energía se corresponde con el caso HFB+AMP. La proyección a ambos operadores (HFB+PNAMP) hace que se gane más energía. Observamos que, en este segundo caso, el mínimo oblatado se ve acentuado y desplazado al valor  $-80 \text{ fm}^2$  y que en la parte prolata aparece una estructura de dos mínimos (entre  $80$  y  $120 \text{ fm}^2$ ). Esto es debido a que en un núcleo las correlaciones de apareamiento dependen fuertemente de la cantidad de niveles de partícula independiente (Nilsson) alrededor del nivel de Fermi. Si la densidad de niveles es baja, el apareamiento será débil presentando mínimos en las deformaciones en las que se produzcan cruces de niveles. Es sabido que la aproximación de HFB es buena en el régimen

de fuertes correlaciones de apareamiento y mala en el caso de débiles. Es por ello que se hace necesario salvar este inconveniente implementando otra aproximación que arroje mejores resultados, llamada PN-VAP+PNAMP.

Dicha aproximación es la que presenta la superficie menos plana de las tres (mínimos y máximos más acentuados) y con una barrera (distancia entre el máximo relativo y el mínimo) mayor, además es la más profunda de las tres. Desaparece la estructura de dos mínimos en la parte prolata, aparece sólo un mínimo relativo mayor que el que se aprecia en la parte oblate y se encuentra un hombro prolata superdeformado.

### 4.3. Una nueva coordenada: $\delta$

El apareamiento es una parte esencial de la interacción nuclear. La parte de corto alcance de la interacción favorece energéticamente la formación de pares de nucleones acoplados a momento angular cero. El modelo de HFB permite tratar al mismo nivel las correlaciones nucleares de largo alcance (correlaciones partícula-hueco) y las correlaciones que vienen de la parte de corto alcance de la fuerza nuclear (correlaciones partícula-partícula). Las primeras están relacionadas con la deformación nuclear y, por tanto, se pueden estudiar mediante fluctuaciones en la variable  $q$ . Las segundas están relacionadas con el apareamiento y permiten explicar evidencias experimentales como son entre otras [58]: que los estados fundamentales de los núcleos par-par tienen un momento angular total igual a cero; sólo hay cuatro núcleos impar-impar estables o el conocido efecto par-impar en la energía de ligadura. Como novedad que se presenta en este trabajo, vamos a incluir otro grado de libertad extra para estudiar las fluctuaciones de apareamiento.

En el espacio gauge asociado al apareamiento, la función de onda HFB tiene dos grados de libertad colectivos. Por un lado el gap de apareamiento,  $\Delta$ , que nos da una medida de la cantidad de las correlaciones de apareamiento, esto es, la deformación en el espacio gauge asociado [95]. Por otro, el ángulo  $\varphi$  (3.52), el cual indica la orientación del estado en este espacio. Una minimización tipo HFB nos permite determinar la función de onda y por tanto  $\Delta$ , mientras que el ángulo  $\varphi$  no va a jugar ningún papel a nivel de campo medio como se ha visto en el capítulo anterior. Si se toman combinaciones lineales apropiadas de las funciones de onda con diferente orientación en el espacio gauge se obtienen funciones de onda con el número de partículas conservado [71]. Sin embargo, las fluctuaciones de apareamiento en torno al valor de  $\Delta_0$  que se encuentra para el valor mínimo de la energía asociado a funciones de onda con diferentes gaps de apareamiento no han sido estudia-

das con tanto detalle. De hecho, solo han sido consideradas en el marco del hamiltoniano colectivo [96–99]; cálculos con modelos microscópicos [100,101], o con espacios de configuración reducidos [102] o bien sin considerar proyecciones [103].

Conviene aclarar que, en el marco teórico en el que se desarrollan los cálculos, sólo se contempla el canal ( $T = 1, T_z = \pm 1$ ) de apareamiento, no hay apareamiento en  $T = 0$  ni en ( $T = 1, T_z = 0$ ), por lo que sólo se tiene apareamiento protón-protón y neutrón-neutrón mientras que se desprecia el apareamiento protón-neutrón. Para los casos en los que  $N \simeq Z$ , los respectivos niveles de Fermi son muy parecidos, y podría resultar interesante incluirlo.

Si se considerara el apareamiento protón-neutrón, se violaría la simetría de la tercera componente de isospín y sería necesario restaurarla con una proyección. Además, se rompería la estructura de bloques del tensor de apareamiento por lo que la complejidad de los cálculos aumentaría, motivo por el cual esta cuestión está fuera del ámbito de este trabajo.

Para ver la relación entre el gap de apareamiento con las fluctuaciones en el número de partículas tomamos como punto de partida una de las aproximaciones más sencillas en la que esté presente el apareamiento, esto es, una función tipo BCS:

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_k (u_k + v_k c_{k+}^\dagger c_{k-}^\dagger |-\rangle) \quad (4.6)$$

La minimización de la energía BCS va a dar como solución los coeficientes  $v_k, u_k$  y el gap de apareamiento  $\Delta = G \sum_k u_k v_k$ . Esta cantidad va a dar una medida de la *deformación* [95] en el espacio gauge asociado a  $\hat{N}$ . Como el hamiltoniano conmuta con  $\hat{N}$  la variable  $\varphi$  va a medir la orientación de  $\Delta$  en el espacio y puede tomar cualquier valor. Esta degeneración en la energía puede ser utilizada en la expresión (3.52) para construir los autoestados del número de partículas  $P^N |\text{BCS}\rangle$ . La función de onda incluye todas las fluctuaciones asociadas a  $\varphi$ , sin embargo, se corresponde con un valor del gap fijo. Una manera de considerar fluctuaciones a lo largo de  $\Delta$  es generar soluciones tipo BCS con diferentes gaps. Al resolver el conjunto de ecuaciones BCS, encontraremos la solución autoconsistente para la ecuación del gap [58], que será  $|\text{BCS}(\Delta_0)\rangle$  siendo  $\Delta_0$  el valor más probable para el gap.

Es necesario mencionar que con la interacción que se está utilizando, no es posible constreñir en  $\Delta$  debido a que en dicha interacción, los  $\Delta$ s dependen del orbital, esto es,  $\Delta_l$ . De modo que es necesario encontrar un operador que nos de una medida de las correlaciones de apareamiento y permita fluctuacio-

nes en su valor. Para este propósito se ha utilizado la desviación cuadrática media del número de partículas,  $\Delta N^2$ . Esta cantidad es cero en ausencia de las correlaciones de apareamiento y tiene valores grandes para sistemas fuertemente correlacionados.

En una interacción de apareamiento esquemática monopolar, las fluctuaciones en el número de partículas están determinadas por:

$$\langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle = 4 \sum_{k>0} u_k^2 v_k^2 = \Delta^2 \sum_{k>0} \frac{1}{E_k^2}, \quad (4.7)$$

donde  $E_k$  es la energía de quasipartícula. Si la función de onda es autoestado del número de partículas el valor  $\Delta N^2 = 0$ . Esto se corresponde con una solución pura de HF que no contiene correlaciones de apareamiento. Si trabajamos dentro de la aproximación de HFB, la transformación dada en la expresión (3.3) no conserva el número de partículas pues mezcla operadores de creación y destrucción. Si la densidad de niveles alrededor del nivel de Fermi es grande, lo que provoca una intensidad de la interacción de apareamiento efectiva más o menos grande, la solución de HFB rompe la simetría del número de partículas y las superficies de energía van a presentar un mínimo para un valor de  $\Delta N^2 \neq 0$ . En caso contrario, la solución de HFB colapsa a la solución de HF con  $\Delta N^2 = 0$ .

Como queda reflejado en la ecuación (4.7), se da una relación de proporcionalidad que existe entre el operador y el gap apareamiento:

$$\Delta \propto \langle (\Delta \hat{N})^2 \rangle^{1/2}. \quad (4.8)$$

De manera que  $(\Delta \hat{N})^2$  nos da una medida del contenido de apareamiento presente en la función de onda. Por tanto, parece razonable tomar este operador para estudiar las fluctuaciones de apareamiento.

Quedan así definidos los dos operadores:  $\hat{Q}_{20}$  y  $(\Delta \hat{N})^2$ , que van a ser utilizados a lo largo de esta memoria. Haciendo uso de la expresión (3.39) aplicada sobre el nuevo operador, denotamos:

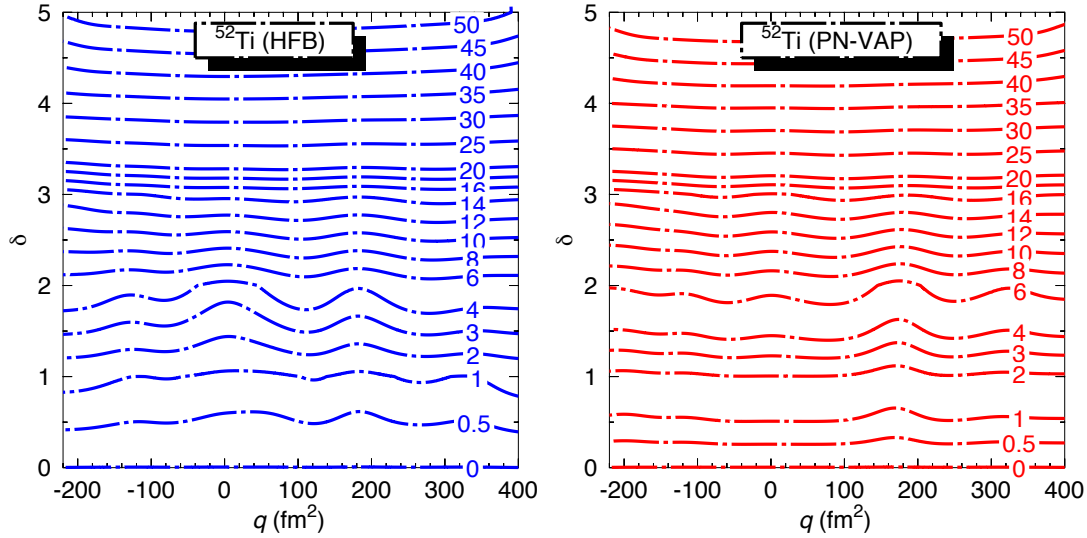
$$\delta = \langle \phi | (\Delta \hat{N})^2 | \phi \rangle^{1/2}, \quad (4.9)$$

siendo  $\delta$  la coordenada que nos va a permitir generar funciones de onda con diferente apareamiento. Para la otra coordenada, asociada a la forma del núcleo o deformación, tenemos la expresión dada en la ecuación (4.2).

De modo que  $\mathbf{q}$  y  $\boldsymbol{\delta}$  son los dos grados de libertad o coordenadas generadoras a las que nos referiremos a partir de ahora. Llamaremos 1D a los cálculos que solo incluyan de forma explícita  $q$  y 2D a aquellos que dependan simultáneamente de  $q$  y  $\delta$ .



Para justificar la conveniencia de la elección de la coordenada  $\delta$  para estudiar las correlaciones de apareamiento, representamos en la figura (4.2) la energía de apareamiento, ecuaciones (3.28) y (3.74), en el plano  $(q, \delta)$  para funciones de onda intrínsecas tipo HFB (izquierda) y PN-VAP (derecha) para el núcleo tomado como ejemplo, el  $^{52}\text{Ti}$ .



**Figura 4.2:** Curvas equipotenciales del valor de la energía de apareamiento en MeV en el plano  $(q, \delta)$  para los dos tipos de función de onda intrínseca que estamos estudiando; HFB (izquierda) y PN-VAP (derecha) para el núcleo  $^{52}\text{Ti}$

Si miramos la figura, observamos que el rango de energía de apareamiento que estamos cubriendo es muy amplio, de 0 a 50 MeV, lo que nos va a permitir tener funciones de onda con bajo, medio y alto apareamiento y estudiar estos regímenes en cualquier núcleo, independientemente de cuantos nucleones fuera de capa tenga a priori. Los cálculos con una sola ligadura en la deformación ( $q$ ) hacen que el grado de libertad de apareamiento se adapte a la densidad de niveles alrededor del nivel de Fermi que se tenga para cada  $q$  y quede restringido a un régimen determinado. Con esta nueva ligadura, por tanto, se va a poder soslayar dicha limitación, obteniéndose una relación entre la energía de apareamiento y el parámetro delta casi independiente del núcleo en cuestión, como se puede apreciar en la figura (4.2).

Se obtienen líneas rectas que nos indican que la energía de apareamiento crece de manera continua con  $\delta$  y que es independiente de  $q$  para un  $\delta$  dado, excepto pequeñas oscilaciones para valores pequeños de delta. Esto coincide con la simplificación del sistema dada en la ecuación (4.7). De este modo, es posible justificar que la elección de la coordenada  $\delta$  para constreñir en

ella y generar funciones de onda con diferente contenido de apareamiento es acertada.

La diferencia que se da entre los dos casos con diferentes funciones de onda intrínsecas es, principalmente, que para un  $\delta$  fijo las energías de apareamiento son un poco mayores para el caso PN-VAP.

Por último, estos cálculos son posibles gracias al método de los gradientes conjugados [67]. Dicho método, aplicado para resolver las ecuaciones HFB y/o PN-VAP, hace que se puedan construir las funciones de onda intrínsecas que minimizan la energía (HFB o PN-VAP) para valores a la carta de  $(q, \delta)$  incluso para funciones de onda cuya energía (HFB o PN-VAP) está muy lejos de la óptima (la correspondiente al cálculo sin ligaduras).

#### 4.4. PES 2D en diferentes aproximaciones para el <sup>52</sup>Ti

Una vez que hemos definido la nueva coordenada  $\delta$  y hemos visto las superficies de energía potencial como función de la deformación, extendemos el análisis de las superficies de energía potencial visto en la sección 4.2 al caso en el que se incluye  $\delta$ . El uso de ligaduras nos permite definir superficies de energía potencial en las direcciones marcadas por los valores esperados de los operadores en los que se constriñen, en esta sección, la deformación cuadrupolar axial  $q$ , y la fluctuación de la energía de apareamiento,  $\delta$ . Para este caso en dos dimensiones las superficies de energía potencial vienen definidas por la expresión general:

$$E^{2D} = \frac{\langle \Phi^{NZJ}(q, \delta) | \hat{H} | \Phi^{NZJ}(q, \delta) \rangle}{\langle \Phi^{NZJ}(q, \delta) | \Phi^{NZJ}(q, \delta) \rangle} \quad (4.10)$$

Tendremos, por tanto, la energía en el plano  $(q, \delta)$  y en lugar de curvas, tendremos ahora contornos equipotenciales, donde los valores para  $q$  están en fm<sup>2</sup> y la energía en MeV. Las superficies de energía potencial en 2D para el Titanio se pueden ver en la figura (4.3). Vamos a tener diferentes superficies para varias aproximaciones en función de las proyecciones que han sido tenidas en cuenta y se va a analizar el papel que desempeña cada una.

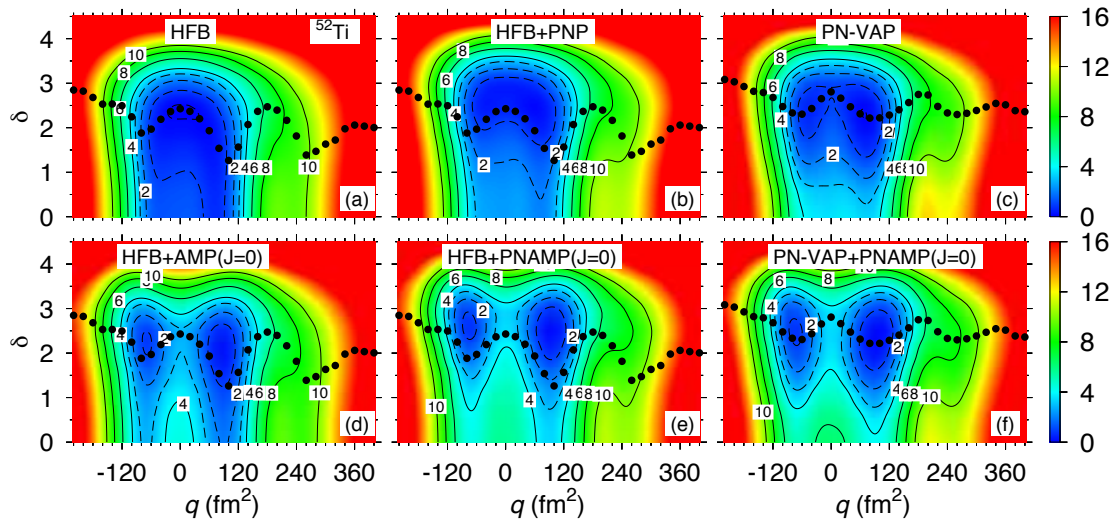
Al hacer un primer análisis unidimensional de la energía, tomando como dirección relevante el momento cuadrupolar, hemos obtenido para cada valor de la deformación el valor asociado de  $\delta$ . Ésta, es la solución autoconsistente que se puede ver representada en forma de puntos que siguen un camino perpendicular a las líneas equipotenciales. Vamos a tener dos tipos de líneas, una para cada tipo de función de onda intrínseca, HFB o PN-VAP, que van a ser

comunes a todas las aproximaciones que partan de la misma función de onda.

Si partimos del caso puramente HFB, panel (a), encontramos una región delimitada, en el eje de las abscisas por  $q = -60 \text{ fm}^2$  y  $q = 100 \text{ fm}^2$  y en el eje de ordenadas por  $\delta = 0$  y  $\delta = 2.5$ , dentro de la cual el potencial es *blando* en ambas direcciones. Por *blando* queremos señalar que dado un valor de  $\delta$  (o  $q$ ) cuesta poca energía, alrededor de 1 MeV para la región indicada, desplazarnos a lo largo de ese valor.

Dentro del mismo intervalo de deformación, pero para un  $\delta$  entre 2.5 y 4, la energía necesaria para aumentar las correlaciones de apareamiento del sistema es mucho mayor, en torno a 10 MeV. Para valores mayores de delta esa energía crece hasta superar los 20 MeV.

Si nos movemos dentro de la variable  $q$  el resultado es análogo; fuera del rango indicado el potencial se vuelve *duro* (crece muy rápido con pequeñas variaciones de la deformación) y llevar al núcleo hasta esas deformaciones es muy costoso energéticamente.



**Figura 4.3:** Superficies de energía potencial para el  $^{52}\text{Ti}$  en el plano  $(q, \delta)$  para diferentes aproximaciones. En líneas de trazos se pueden ver los contornos desde 0 hasta 3 MeV de uno en uno. En línea continua los contornos desde 4 a 10 MeV en intervalos de 2 MeV. A la derecha se puede ver la escala de colores en MeV. Cada superficie ha sido normalizada a cero de forma independiente con respecto a su mínimo de energía. Los puntos son la solución autoconsistente tipo HFB o PN-VAP, según corresponda.

A continuación, proyectamos la solución del caso anterior a buen número de partículas. Para una proyección PAV encontramos la solución HFB+PNP

que se muestra en el panel (b). El potencial alrededor del mínimo sigue siendo muy plano y éste se desplaza hasta  $\delta = 2.5$  mientras que su energía baja en 1.37 MeV.

Si se hace una proyección VAP encontraremos la solución con funciones de onda intrínsecas tipo PN-VAP, panel (c). Esta curva se parece a la anterior, ya que también se observa el potencial desplazado a valores mayores de delta y un mínimo más profundo. Que ambas curvas se parezcan, es debido a que si a la aproximación HFB+PNP se le permite explorar las fluctuaciones de apareamiento, tenderá hacia la solución que se obtiene con la aproximación PN-VAP.

No obstante, en este caso, aparecen definidos dos mínimos, uno más profundo prolate en ( $q = -40 \text{ fm}^2$ ,  $\delta = 2.5$ ) y otro oblate en ( $q = 60 \text{ fm}^2$ ,  $\delta = 2.5$ ). El mínimo absoluto es más profundo, baja 2.54 MeV con respecto a la solución pura de HFB. Esto supone 1.17 MeV con respecto al tipo de proyección anterior, lo que remarca la importancia que tiene hacer la proyección antes de la variación. Se puede ver, como en este caso, la línea de puntos que marca la solución autoconsistente pasa exactamente por los mínimos de la superficie. Estas dos ideas son un indicativo de que la aproximación PN-VAP es la manera correcta de aplicar el principio variacional, pues se minimiza la energía calculada ya con el número correcto de partículas. No sólo es importante por el hecho de que el principio variacional sea más efectivo encontrando la energía sino que además, para otros observables relevantes pueden obtenerse divergencias en los resultados por la falta de autoconsistencia.

Continuamos con la proyección del momento angular, para momento  $J = 0$ . Empezamos proyectando la solución HFB lo que nos lleva a la aproximación HFB+AMP que se puede ver en el panel (d). Dado que las funciones de onda en esta aproximación no dan en promedio el número de partículas correcto, se ha aplicado a cada punto de la red la corrección al número de partículas dada por los multiplicadores de Lagrange. Esta corrección es discutida con más detalle en la sección 6.3.1 en la que se va a analizar de manera más pormenorizada la proyección al momento angular.

Se observa que la solución autoconsistente se encuentra por debajo de los mínimos.

La proyección a momento angular hace que se encuentren dos mínimos mucho más diferenciados que si solo se tiene en cuenta la proyección al número de partículas. Los efectos de una proyección AMP hacen que los potenciales sean más anchos y los mínimos sean más profundos y desplazados a valores mayores de  $q$ . En este caso,  $q = -80 \text{ fm}^2$  para el mínimo oblate y  $q = 80 \text{ fm}^2$  para el prolate.

En los paneles (e) y (f) podemos ver los potenciales que guardan más parecido entre sí, correspondientes a las aproximaciones HFB+PNAMP y PN-VAP+PNAMP respectivamente. El mínimo oblado se encuentra ahora en  $q = -80 \text{ fm}^2$  y el prolado en  $q = 100 \text{ fm}^2$ . Con respecto al otro grado de libertad, los mínimos se dan para  $\delta = 2.5$ , mientras que para el HFB+AMP se encontraba en  $\delta = 2$  lo que supone una diferencia de energía de apareamiento de aproximadamente 4 MeV si miramos la gráfica (4.2). El hecho de que el mínimo para el caso HFB+AMP esté en una región de débil apareamiento tendrá importantes consecuencias, ya que el momento de inercia asociado a la dinámica del sistema va a ser mayor que los asociados a los que tengan proyecciones al número de partículas (PN), dando como resultado un espectro más comprimido. La energía que gana el mínimo absoluto de la aproximación PN-VAP+PNAMP con respecto al caso HFB es de 4.53 MeV y de 2.71 MeV con respecto a PN-VAP.

## 4.5. Cálculos GCM

Por último, tras obtener los diferentes estados  $|\Phi(q, \delta)\rangle$  que van a conformar una base para cada aproximación usada, se utiliza el método GCM, explicado en la sección 3.5. A lo largo de las siguientes subsecciones, continuamos estudiando los principales aspectos del método seguido para estudiar las fluctuaciones de apareamiento, pero ahora con cálculos que involucran el método GCM.

La función de onda va a ser superposición de funciones de onda con diferentes valores de  $q$  y  $\delta$ .

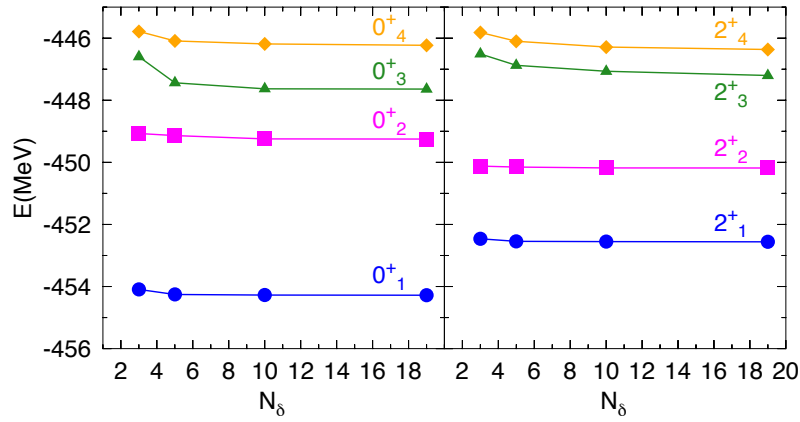
$$\Phi^{NZJ\sigma} = \int_0^\infty f_\sigma(q, \delta) \hat{P} |\phi(q, \delta)\rangle dq d\delta \quad (4.11)$$

Resolviendo la ecuación 3.131 obtenemos las energías  $E^{NZJ\sigma}$ . Se muestran los niveles GCM de energía etiquetados por  $\sigma = 1$  para el fundamental y  $\sigma = 2, \sigma = 3, \sigma = 4$  para los siguientes estados excitados.

### 4.5.1. Tamaño de la base para la coordenada $\delta$

Lo primero que vamos a analizar, es el tamaño apropiado que debe tener la nueva base en la que vamos a trabajar. Mientras que el intervalo y el tamaño de la base cuando se considera  $q$  como coordenada es conocido, pues es la que ha sido, por lo general, considerada hasta ahora [14, 17, 78], la inclusión de una nueva coordenada implica tener que conocer el tamaño de

la base idóneo asociado al grado de libertad  $\delta$ . En la sección 4.3 ya se ha visto la relación entre  $\delta$  y la energía de apareamiento, pero, aparte de los extremos del intervalo, es necesario determinar el número de puntos que es necesario tomar entre ambos. Tomamos el núcleo  $^{52}\text{Ti}$  y resolvemos la ecuación (3.131) en la aproximación PN-VAP+PNAMP tomando el intervalo de  $\delta$  fijo, desde 0 hasta 4.5, pero tomando diferente número de puntos ( $N_\delta$ ) entre dicho intervalo. Hemos tomado  $N_\delta = 3, 5, 10$  y 19. De esta manera, se va a determinar el tamaño óptimo del conjunto de estados intrínsecos que se usan para hallar los estados GCM, ecuación (3.130).



**Figura 4.4:** Energías de los estados excitados más bajos de  $0^+$  y  $2^+$ , unidos por líneas, como función del número de valores de  $\delta$  (3, 5, 10 ó 19) usados en el cálculo de la energía con la aproximación PN-VAP+PNAMP para el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ .

En la figura (4.4) podemos ver las energías que se obtienen para los tres primeros estados con momento angular  $J = 0$  y  $J = 2$  en función de  $N_\delta$ . Viendo los resultados, podemos concluir que tomar 10 valores entre  $\delta = 0 - 4.5$  para cada valor fijo de  $q$  es una buena elección que garantiza que la energía tenga buena convergencia.

Por lo tanto, se va a definir una red bidimensional, en la que se van a desarrollar los cálculos, que va a depender de dos coordenadas. La coordenada  $q$ , va a variar desde  $-220 \text{ fm}^2$  hasta los  $400 \text{ fm}^2$ , con un incremento de  $20 \text{ fm}^2$ . Para la coordenada que explora el apareamiento,  $\delta$ , se van a tomar valores desde 0 hasta 4.5 con un incremento de 0.5. Esto supone un total de 32 puntos para el caso unidimensional, en el que solo  $q$  es considerado y una red de 320 puntos para el caso bidimensional.

Es importante aclarar que no sólo los extremos, de ambas coordenadas, han sido seleccionados de manera que, para los diferentes núcleos que han sido escogidos para el estudio, se obtenga convergencia en la energía, sino que

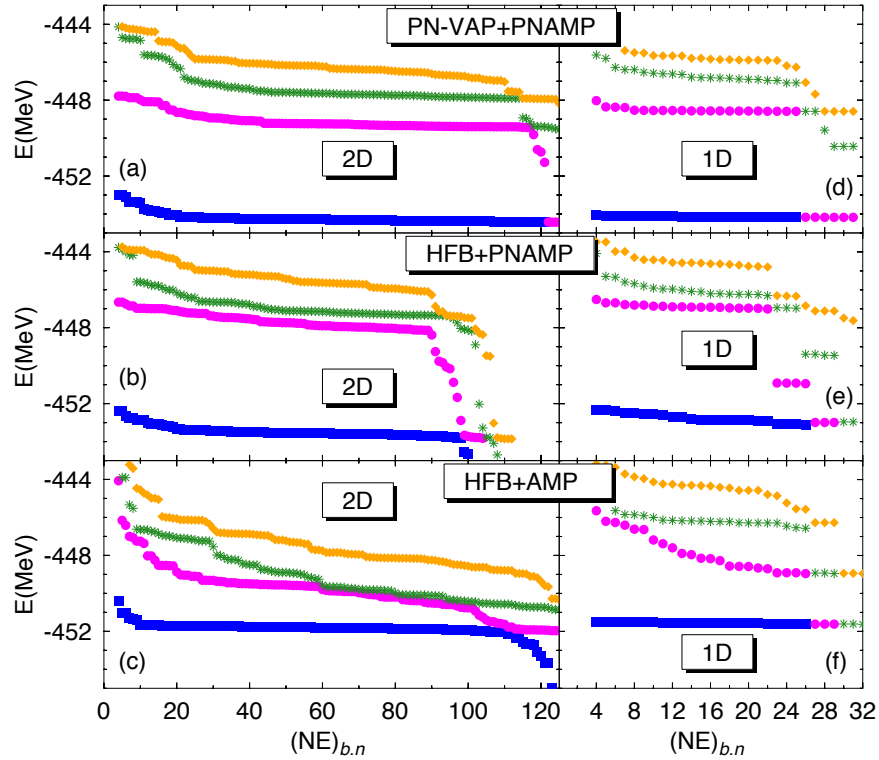
además se garantice que las funciones de onda colectivas caigan hasta tomar el valor cero dentro de ambos intervalos. Estas funciones de onda se pueden encontrar en la sección 8.3.

### 4.5.2. Convergencia para la energía

Existe otro problema de convergencia, pero en este caso inherente a la resolución de la ecuación de HW (3.131). Está originado, como ya ha sido mencionado, por la no ortogonalidad de los estados  $|\phi(q, \delta)\rangle$  que forman la base. Para resolver este problema se construye una base natural, ecuación (3.138), que sí va a ser ortonormal, donde solo van a entrar los estados linealmente independientes, quedando excluidos los que tengan un autovalor de la norma cero o muy cercana a cero, que son los que serían linealmente dependientes [58]. Sin embargo, el número de estados de la base natural que van a ser tenidos en cuenta en la diagonalización de la ecuación de HW es, en cierto modo, arbitrario pues depende de un valor de corte que se debe fijar para el autovalor de la norma que sea cercano a cero, por debajo del cual esos estados naturales van a ser desechados. Determinar ese valor de corte, no solo no es fácil, sino que su dificultad se incrementa al aumentar el tamaño de la base, ya que se tiene una disminución muy progresiva de dichos autovalores hasta alcanzar valores muy pequeños. Para lidiar con este problema, se estudia la convergencia de la energía y la correspondiente función de onda como función del número de estados de la base natural, denotado como  $(NE)_{b,n}$ , que se toman en la diagonalización de la ecuación de HW. Para obtener convergencia en la energía, o en cualquier otro observable, se pide alcanzar en una región un valor más o menos constante del mismo, lo que se conoce con el nombre de *plateaus* [84]. La elección final de  $(NE)_{b,n}$  es aquel en el que se observa un plateau grande para todos los estados con el mismo momento angular y para el cual las funciones de onda colectivas no cambian. Para estados con el mismo  $J$  el valor de  $(NE)_{b,n}$  debe ser el mismo, pues se debe garantizar la ortogonalidad de las funciones de onda correspondientes.

Esta convergencia se puede ver en los plateaus de la figura (4.5) donde se ha representado las energías como función de  $(NE)_{b,n}$  para los estados  $0^+$  en un cálculo 2D (figuras de la izquierda) y 1D (figuras de la derecha) en las tres aproximaciones en las que se trabaja. Las funciones de onda correspondientes se pueden encontrar en las secciones 8.3 y 8.4.

Pese a las diferencias devenidas de la dependencia lineal de la base u otros aspectos, vamos a obtener un comportamiento general muy parecido, que puede verse en la figura (4.5), cuando los estados naturales son ordenados por orden decreciente de los autovalores de la norma: para autovalores



**Figura 4.5:** Energías de los 4 estados excitados  $0^+$  más bajos para el núcleo  $^{52}\text{Ti}$  ( $0_1^+$  en cuadrados azules,  $0_2^+$  en círculos magentas,  $0_3^+$  en asteriscos verdes y  $0_4^+$  en diamantes naranjas). Los paneles de izquierda se corresponden con cálculos 2D mientras que los de la derecha con los del caso 1D. Se puede ver la aproximación utilizada en cada caso en la leyenda de la figura.

grandes de la norma, la energía va disminuyendo de forma considerable hasta alcanzar un valor, más o menos constante, donde las contribuciones que se obtienen al añadir un nuevo estado a la base natural son casi inapreciables. Como el valor de las normas va a seguir decreciendo hasta hacerse casi cero, se puede encontrar un punto en el cual la energía diverge a valores negativos muy profundos.

En general, se va encontrar una mejor convergencia para aquellos estados más bajos en energía.

En particular para la figura (4.5), si miramos las gráficas (a) y (b), encontramos que para el caso 2D, por debajo de 30 estados naturales, estamos en una zona en la que todavía no se encuentra la convergencia. Entre 30 y 90 estados, hay un plateau donde las contribuciones que se obtienen al añadir más estados, son muy pequeñas. Para un número mayor de estados, en torno



a 90 y 100 respectivamente para cada caso, se tiene una gran dependencia lineal, las contribuciones a la energía son espurias y muy grandes. En este punto, las funciones de onda también van a modificar su estructura y, cualquier observable que se intente calcular con este número de estados, va a tomar valores no realistas.

Si nos centramos en los casos 2D, observamos plateaus relativamente grandes para las aproximaciones HFB+PNAMP y PN-VAP+PNAMP lo que nos indica que tenemos una buena convergencia, además se puede establecer un parecido entre ellos. Sin embargo, para el caso HFB+AMP la situación es diferente; obtenemos peor convergencia pues los plateaus son peores, los niveles están más amontonados entre sí, incluso unos caen encima de los otros y los plateaus son de menor tamaño. El hecho de no proyectar al número de partículas acarrea mayor dependencia lineal y estados menos puros, esto es, más mezcla. Esto será una constante para esta aproximación que afectará a diferentes propiedades y se mostrará más adelante.

Si nos movemos a la derecha y observamos los plateaus que se producen para los casos de 1D, veremos que la situación es parecida, para el caso HFB+AMP los plateaus que se encuentran son peores. Sin embargo, para el caso 1D tenemos una base diez veces más pequeña de modo que su dependencia lineal es nula o muy pequeña, por lo que este efecto es menos acusado que en el caso 2D.

Este estudio de la convergencia se realiza para cada núcleo que se calcula y para los diferentes momentos angulares ( $J = 0, 2, 4, 6$ ) que son examinados. La situación descrita aquí se repite, de modo que las conclusiones mencionadas son aplicables a estos otros casos diferentes.

### 4.5.3. Espectros para el $^{52}\text{Ti}$

Una vez definida la red de valores para  $q$  y  $\delta$ , así como el criterio de convergencia para la solución de la ecuación HW, obtenemos como resultado final del cálculo los estados GCM para el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ .

Las superficies de energía potencial analizadas en la sección anterior representan, de alguna manera, los elementos de matriz diagonales del solape del hamiltoniano normalizado. A continuación, se aplica el método GCM al conjunto de las diferentes funciones de onda intrínsecas con sus correspondientes proyecciones, de manera que los elementos fuera de la diagonal van a ser incorporados al resolver la ecuación de HW (3.131). Esto nos permite ver la ganancia de energía que se obtiene de la mezcla de configuraciones a la vez que se pueden estudiar los espectros de excitación, entendidos como la dife-

rencia de energías que se obtiene entre un estado excitado con respecto a la del estado fundamental.

La ganancia de energía va a estar relacionada con la aproximación que utilicemos. Por este motivo, esperamos que las correlaciones dinámicas que va a dar el método GCM den contribuciones menores para el caso PN-VAP+PNAMP ya que en este método la proyección se hace antes de la variación y es auto-consistente.

Analizamos primero la evolución del valor absoluto de las energías cuando se va afinando la función de onda mediante el uso de diferentes proyecciones. Para ello, se han representado en la figura (4.6) dichas energías, tanto para el caso 1D como 2D, para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$ . Los valores de las energías están recogidos en la tabla (4.2).

En el eje de abscisas se puede ver la aproximación que se usa. El punto de partida sería el estado etiquetado como HFB o PN-VAP, que son los dos tipos de funciones intrínsecas a las que posteriormente se le van a aplicar distintos proyectores. El comportamiento general es el siguiente: por un lado, dentro de una misma aproximación, el caso 2D siempre está energéticamente por debajo del 1D. Esto es claro, ya que lo que implica pasar de un cálculo 1D a otro 2D, es añadir un grado de libertad extra. Por otro, la energía del estado fundamental siempre decrece según la complejidad de la función de onda aumenta.

Si nos centramos en los estados tipo HFB, observamos que si miramos de forma separada a la izquierda de esta solución, caso PNP, y a la derecha, caso AMP, lo que se obtiene es una energía menor en ambos casos. Sin embargo, las dos proyecciones tenidas en cuenta de forma simultánea, caso PNAMP, no supone un efecto suma de lo que se obtiene por separado para cada una de las proyecciones. Se produce un efecto de interferencia por el cual algunos estados, como el  $0_2^+$  y el  $0_3^+$ , en 1D y 2D, sufren un incremento de la energía en comparación a cuando solo se implementa una única proyección.

Para las aproximaciones PN-VAP y PN-VAP+PNAMP, se observa, como es esperado, menor ganancia de energía entre el caso 1D y 2D en comparación a lo que ocurre con las aproximaciones que tienen como punto de partida funciones de onda intrínsecas tipo HFB (HFB+PNP y HFB+PNAMP).

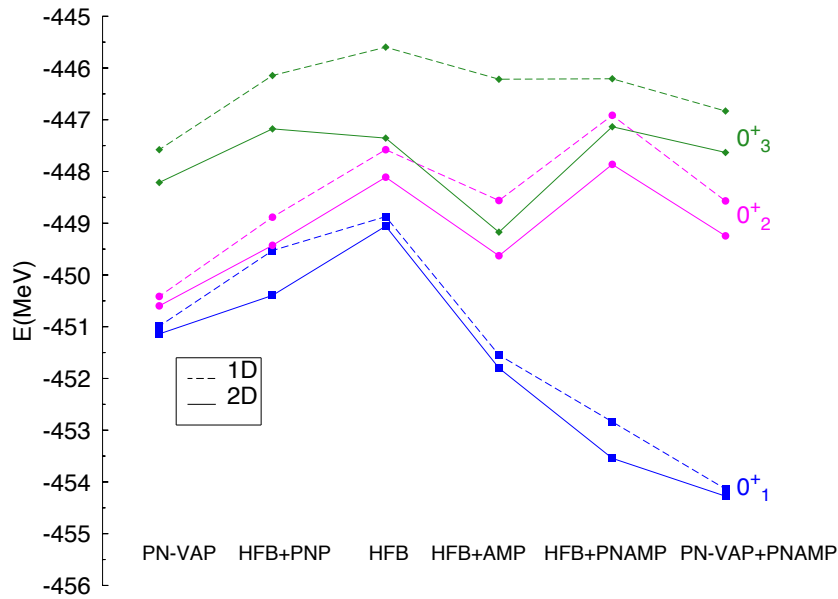
Si miramos los dos casos situados más a la izquierda (o bien los dos que están más a la derecha), se puede ver la diferencia entre una proyección al número de partículas tipo VAP o PAV tanto para el caso 1D como para el 2D. Para el fundamental en 1D, la ganancia entre el caso VAP y PAV es de

aproximadamente 1.5 MeV. Para las mismas aproximaciones, pero en 2D, esta diferencia pasa a ser de 0.75 MeV. Si se incluye la proyección al momento angular la ganancia que se va a obtener, tanto para los casos HFB o PN-VAP como para los casos 1D o 2D, es de aproximadamente 3 MeV. La diferencia de energía que se obtiene entre las aproximaciones HFB+PNAMP y PN-VAP+PNAMP es de 1.3 MeV para el caso 1D y 0.73 MeV para el caso 2D. Según aumentamos la precisión en nuestro método, se gana exactitud en la energía de manera convergente.

Por último, podemos ver que la energía que se gana para el estado fundamental ( $0_1^+$ ) desde la aproximación más simple, HFB en 1D hasta la más sofisticada, PN-VAP+PNAMP en 2D, es de 5.4 MeV, lo que supone una importante cantidad.

A continuación, analizamos los espectros para el  $^{52}\text{Ti}$  en la figura (4.7) en cálculos 1D (línea azul discontinua) y 2D (línea roja continua). Los valores de las energías han sido normalizados al valor del estado fundamental ( $J = 0, \sigma = 1$ ) y los espectros no han sido agrupados en bandas en base a algún observable, sino que han sido numerados según el orden en el que se han calculado teóricamente con  $\sigma$  creciente para estados más excitados.

Si miramos la parte izquierda de la figura, encontramos el espectro que se corresponde con la aproximación PN-VAP+PNAMP. Cuando las fluctuaciones de apareamiento son incorporadas, el espectro se comprime. Es posible justificar esta idea en base al siguiente argumento: dado que estos cálculos en 1D y 2D son autoconsistentes la energía del estado fundamental antes de la resolver la ecuación de HW, esto es, el mínimo de las superficies de energía potencial, es el mismo en ambos cálculos e incluso muy similar después de resolver la ecuación de HW, como hemos visto en la tabla (4.2). Este resultado es la consecuencia del hecho de que el principio variacional usado para determinar las funciones de onda favorece el estado fundamental. En el caso 1D no hay cabida para que los estados excitados cambien el contenido de apareamiento presente en una función de onda. Sin embargo, el hecho de añadir el grado de libertad del apareamiento para el caso 2D, abre la posibilidad de que las funciones de onda para un determinado  $q$  varíen su apareamiento, consiguiendo con esto una bajada de la energía que hace que los niveles de los espectros se encuentren ahora más juntos.



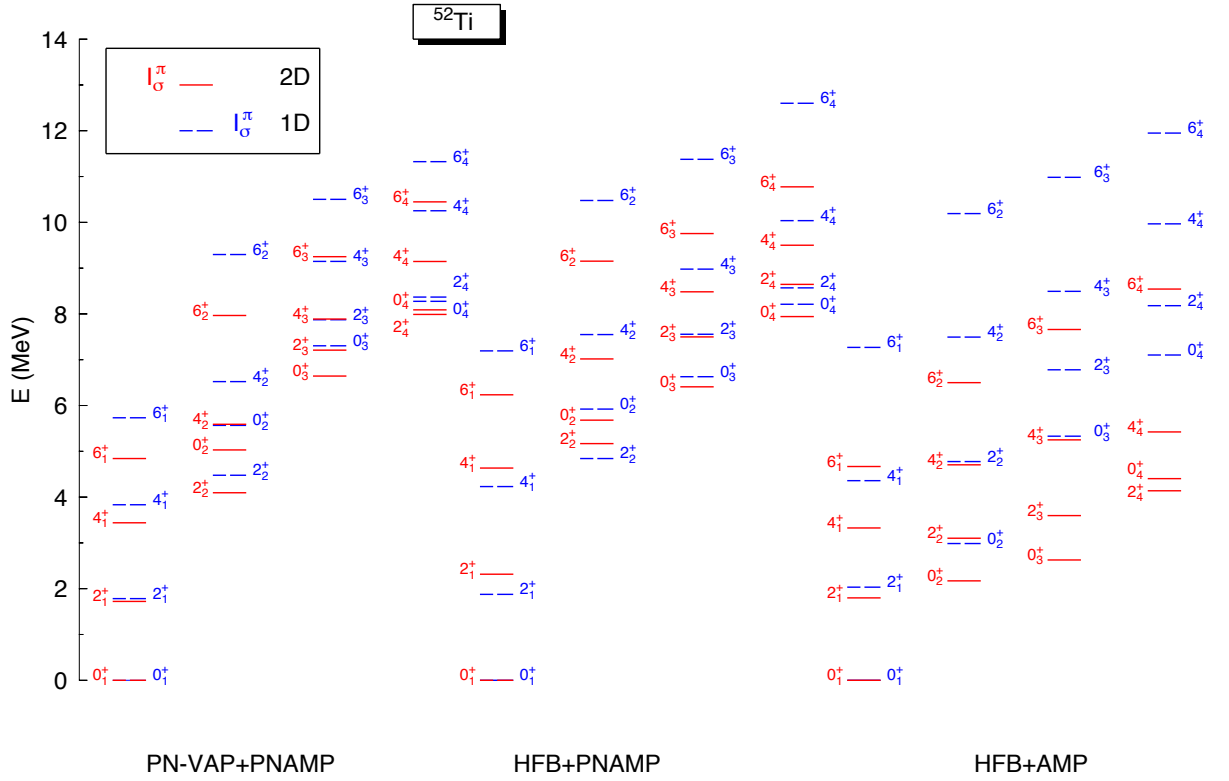
**Figura 4.6:** Evolución de los valores absolutos de las energías para el  $^{52}\text{Ti}$  del estado fundamental para el  $0_1^+$  (azul) y los excitados  $0_2^+$  y  $0_3^+$  (magenta y verde respectivamente) como función de las diferentes aproximaciones (nombres en el eje inferior). La línea continua es para los cálculo en 2D y la discontinua para los de 1D.

		$0_1^+$	$0_2^+$	$0_3^+$
PN-VAP	1D	-450.991	-450.415	-447.579
	2D	-451.140	-450.598	-448.213
HFB+PNP	1D	-449.528	-448.883	-446.145
	2D	-450.395	-449.428	-447.176
HFB	1D	-448.872	-447.578	-445.598
	2D	-449.056	-448.111	-447.355
HFB+AMP	1D	-451.547	-448.561	-446.217
	2D	-451.800	-449.629	-449.173
HFB+PNAMP	1D	-452.837	-446.915	-446.208
	2D	-453.543	-447.863	-447.135
PN-VAP+PNAMP	1D	-454.136	-448.570	-446.832
	2D	-454.275	-449.245	-447.632

**Tabla 4.2:** Energías absolutas (en MeV) de los tres estados:  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$  en varias aproximaciones para el  $^{52}\text{Ti}$ .

En el medio de la misma figura encontramos el caso HFB+PNAMP. Esta aproximación, en general, ofrece unos espectros más estirados que los que da la aproximación anterior. Otra característica que podemos observar aquí, es que varios estados, sobre todo los de la banda Yrast y la siguiente, están invertidos entre sí, encontrando los niveles 1D por encima de los de 2D. Por un lado, tenemos el efecto que supone incluir el grado de libertad  $\delta$  discutido para el caso PN-VAP+PNAMP. Por otro, tenemos el efecto de la falta de autoconsistencia que se da en este caso. Si miramos el panel (e) de la figura (4.3) vemos que el camino marcado por los puntos, que siguen los valores de  $\delta$  del caso 1D, pasan por debajo de los mínimos obtenidos en el caso 2D, por lo que se tienen correlaciones de apareamiento menores. El momento de inercia asociado al movimiento colectivo va a ser mayor para el caso 1D por lo que se va a obtener un espectro más comprimido. Estos dos hechos combinados hacen que encontremos solo los niveles excitados más bajos invertidos.

Como tercer caso, tenemos la aproximación HFB+AMP, a la derecha de la figura. En este caso se encuentra mayor autoconsistencia entre los cálculos 1D y 2D como puede verse en la superficie de energía potencial, panel (d) de la figura (4.3), de modo que ya no encontramos esa inversión que se daba en el caso anterior y los niveles 2D están por debajo de los de 1D. Lo más notable de esta aproximación, es que encontramos unos espectros, tanto para el caso monodimensional como bidimensional, muy comprimidos comparados con los de las otras dos aproximaciones. En el análisis de la convergencia para los estados GCM, figura (4.5), ya vimos como la convergencia era peor para esta aproximación, se observaba una mayor dependencia lineal en la base lo que hace que los estados sean menos puros. Esto supone una limitación de esta aproximación para describir de forma correcta magnitudes relevantes nucleares. Nos centraremos de nuevo en esta cuestión más adelante: en el capítulo 5 y en la sección 6.4 en la que se van a discutir otros espectros. Mirando las superficies de energía potencial (paneles inferiores:(d), (e) y (f) de la figura (4.3)) se puede anticipar cómo de comprimidos van a estar los espectros. Si miramos los valores de  $\delta$  para los cuales se dan los mínimos y las zonas de alrededor, encontramos que, la que tiene menos correlaciones de apareamiento y es más suave en esta dirección, es la correspondiente al caso HFB+AMP y, por tanto, va a dar el espectro más comprimido. Para los casos PN-VAP+PNAMP y HFB+PNAMP vemos que ambas superficies se parecen más, pero, obtenemos valores más altos en la del caso HFB+PNAMP, por tanto, obtendremos espectros similares para estas dos siendo más estirado el del segundo caso.



**Figura 4.7:** Espectros para el  $^{52}\text{Ti}$  para las aproximaciones PN-VAP+PNAMP (izquierda), HFB+PNAMP (medio) y HFB+AMP (derecha)

#### 4.5.4. Ligaduras en $\delta_Z$ , $\delta_N$ y $\delta$

Para acabar el estudio de la coordenada  $\delta$  dentro del método GCM, hacemos la siguiente consideración: una aproximación más completa del grado de libertad de apareamiento se obtendría estudiando por separado los protones y neutrones, es decir, construyendo en las fluctuaciones del número de partículas siguientes:

$$\langle \phi | (\Delta \hat{N})^2 | \phi \rangle^{1/2} = \delta_N \quad \langle \phi | (\Delta \hat{Z})^2 | \phi \rangle^{1/2} = \delta_Z \quad (4.12)$$

Sin embargo, esta separación aumentaría sobremanera el número de estados incluidos en el cálculo GCM, haciéndolo computacionalmente casi inalcanzable con la capacidad de cálculo actual. Más si cabe, si se van a analizar

37 núcleos, como son analizados en este trabajo y utilizando, para varios de ellos, diferentes aproximaciones.

Para comprobar la validez de la aproximación que se hace en este trabajo, es decir, utilizando las fluctuaciones en el número de partículas total,  $\delta$ , se hacen tres tipos de cálculos. En el primer caso, se constriñe solo a  $\delta_Z$  dejando que  $\langle \phi | (\Delta \hat{N})^2 | \phi \rangle^{1/2}$  alcance el valor autoconsistente que se obtenga al minimizar la energía por el principio variacional. En el segundo caso, es  $\delta_N$  la coordenada que se constriñe, dejando que  $\langle \phi | (\Delta \hat{Z})^2 | \phi \rangle^{1/2}$  varíe libremente. Y por último, el caso que se ha sido utilizado para todo los cálculos que se exponen en esta memoria, donde se constriñe al  $\delta$  total.

	$\delta_Z$			$\delta_N$			$\delta$		
	$E^*$	$P_Z$	$P_N$	$E^*$	$P_Z$	$P_N$	$E^*$	$P_Z$	$P_N$
$0_1^+$	0.00	-4.1	-5.9	0.00	-4.2	-6.2	0.00	-4.0	-5.7
$0_2^+$	4.58	-5.0	-5.9	4.80	-4.5	-6.0	4.65	-4.7	-5.7
$0_3^+$	7.80	-5.1	-4.7	6.76	-4.7	-4.3	7.17	-4.1	-3.7
$2_1^+$	2.60	-4.0	-4.0	2.11	-4.0	-3.1	2.21	-3.5	-3.2
$2_2^+$	5.75	-4.7	-5.2	5.31	-4.5	-3.3	5.59	-4.2	-4.2
$2_3^+$	6.05	-4.2	-4.0	5.88	-4.6	-4.9	5.90	-3.7	-4.0

**Tabla 4.3:** Energía de excitación  $E^*$ , energía de apareamiento para protones ( $P_Z$ ) y neutrones ( $P_N$ ), para los 3 estados más bajos  $0^+$  y  $2^+$  de la ecuación de HW en aproximación PN-VAP+PNAMP constriñendo en  $\delta_Z$ ,  $\delta_N$  ó  $\delta$ .

Es importante notar que, en este caso, los cálculos se han hecho dentro de la aproximación PN-VAP+PNAMP para el núcleo  $^{50}\text{Ca}$ , en lugar de para nuestro ejemplo hasta ahora, el  $^{52}\text{Ti}$ , por un motivo didáctico, ya que su carácter mágico en protones puede ayudar a interpretar mejor los resultados de ambas aproximaciones.

Podemos ver en la tabla (4.3) las energías de excitación y las energías de apareamiento de protones y neutrones para los tres primeros estados excitados de  $0^+$  y  $2^+$ . Las energías del estado fundamental que se encuentran son las siguientes: -428.991 MeV (constriñendo en  $\delta_Z$ ), -428.962 MeV (constriñendo en  $\delta_Z$ ) y -429.037 MeV (constriñendo en  $\delta$ ). La más baja es, como es esperable, para el caso en el que se constriñe a  $\delta$ . Sin embargo, los tres valores son prácticamente iguales. Para los valores mostrados en la tabla, tampoco encontramos desviaciones que tengan que ser subrayadas. Por tanto, al no haberse encontrado grandes diferencias, podemos concluir que la aproximación que estamos haciendo es apropiada para estudiar las fluctuaciones de apareamiento. Un análisis análogo se ha hecho para el  $^{32}\text{Mg}$ , núcleo que

presenta más partículas fuera de capa, obteniendo la misma conclusión.



# Capítulo 5

## Estudio de la aproximación HFB+AMP

Como ya se ha visto en el capítulo anterior, en este trabajo se hace uso de tres aproximaciones diferentes (pueden ser consultadas en la tabla 4.1), en las que se observan importantes diferencias. Las denotadas por PN-VAP+PNAMP y HFB+PNAMP, contemplan la restauración del número de partículas aunque el orden en que se hace la proyección y se minimiza el funcional es diferente (VAP versus PAV). En la tercera de ellas, de nombre HFB+AMP, esta proyección no es tenida en cuenta. Esta última aproximación ofrece unos resultados (consultar capítulos 4 y 6) que no se encuentran en línea con los que se obtienen cuando se utilizan los otros dos métodos.

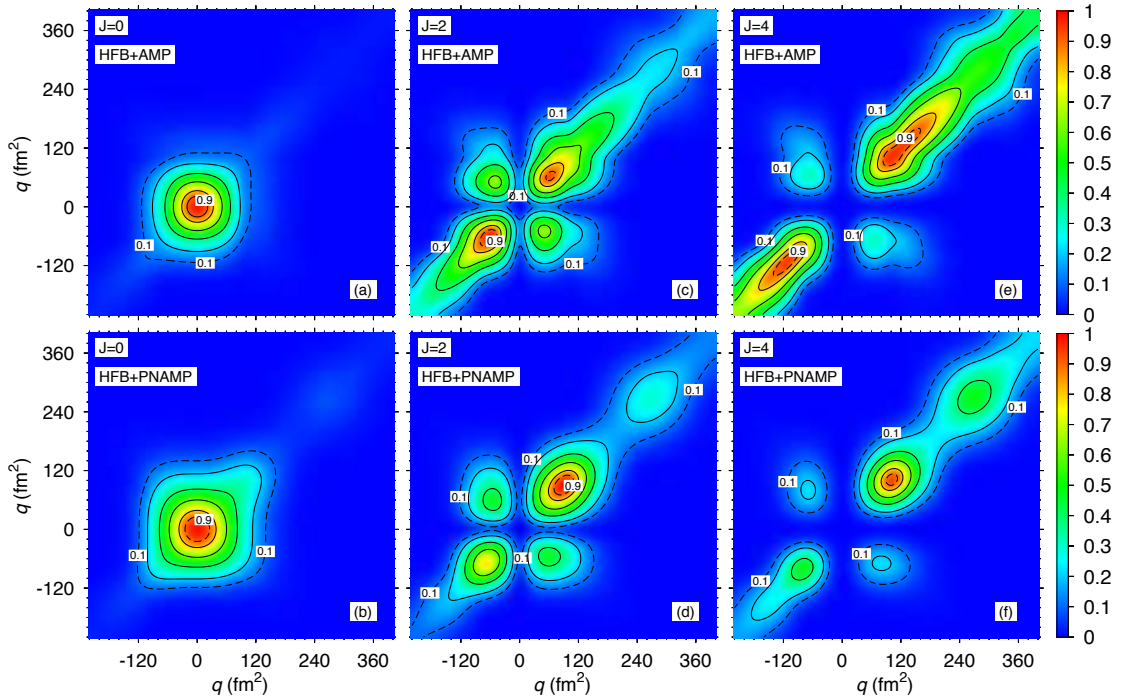
En este capítulo queremos indagar en la procedencia de esas diferencias que hacen que la restauración al número de partículas tenga que ser implementada, por ser crucial para la correcta descripción del sistema. Con este objetivo, se van a hacer dos análisis. Primero, se van a estudiar los elementos de matriz de la norma cuando se proyecta a buen número de partículas y cuando no. Segundo, se va a estudiar la distribución del número de partículas dentro de la aproximación HFB+AMP. Para ello, volvemos a tomar como ejemplo el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ .

### 5.1. Elementos de matriz de la norma.

En la diagonalización de la ecuación de HW (3.131) aparecen dos cantidades; el solape del hamiltoniano y el solape de la norma. En la sección (4.4) se puede encontrar la discusión de los elementos de matriz diagonales del hamiltoniano. Ahora, vamos a concentrarnos en el solape de la norma.

Las diferencias principales que se dan en el solape de las norma, vienen entre las aproximaciones que tienen en cuenta la proyección al número de partículas (PNP) frente a las que no la consideran.

En la figura (5.1) se muestran las normas para momento angular  $J = 0, 2, 4$  en las aproximaciones HFB+AMP (sin proyección al número de partículas) y HFB+PNAMP (incluyendo dicha proyección). Las normas obtenidas con el método PN-VAP+PNAMP son similares a las del caso HFB +PNAMP y no se muestran. Además, para comparar mejor el efecto de la proyección al número de partículas, conviene tomar las mismas funciones de onda intrínsecas.



**Figura 5.1:** Solapes de las normas para el  $^{52}\text{Ti}$ . Estos valores se encuentran renormalizados habiendo sido divididos por un factor tal que, para cada panel, el valor máximo que se obtenga sea igual a uno. En la parte de arriba de la gráfica tenemos la aproximación HFB+AMP. De izquierda a derecha con los correspondientes factores de normalización:  $J = 0$  (factor=1.0),  $J = 2$  (factor=0.484) y  $J = 4$  (factor=0.316). En la parte de abajo, tenemos la aproximación HFB+PNAMP y los momentos angulares normalizados a  $J = 0$  (factor=0.191),  $J = 2$  (factor=0.218) y  $J = 4$  (factor=0.202). En línea discontinua están representados los contornos 0.1 y 0.9 correspondientemente etiquetados y en línea continua los contornos desde 0.2 hasta 0.8 en intervalos de 0.2

Para incluir en el análisis los elementos no diagonales y poder hacer una

representación, es obvio que solo puede hacerse en función de una coordenada. En esta figura se han tomado las normas del caso 1D y se han representado en el plano  $(q, q')$ . Para poder evaluar el comportamiento cualitativo de dichas normas y compararlas en los diferentes casos, todas las aproximaciones han sido divididas por un factor de escala para que el máximo en todas ellas valga la unidad. Para el análisis cuantitativo, esos factores se muestran en el pie de dicha figura.

En los paneles (a) (c) y (e) de la figura (5.1) representamos el valor de la norma:

$$\langle \Phi(q) | P^J | \Phi(q') \rangle. \quad (5.1)$$

En el panel (a) tenemos el caso  $J = 0$ . Las funciones de onda intrínsecas HFB están normalizadas a la unidad, por lo que la norma va a ser la unidad para el caso esférico ( $q = q' = 0$ ) como puede verse en la figura. Tomando ese punto como centro y siguiendo los contornos hacia fuera, observamos una disminución radial exponencial de la norma con  $q$ , hasta encontrar que, para valores con  $q = 100 \text{ fm}^2$ , el máximo es una décima parte de ese valor.

En los paneles (b) (d) y (f) de la misma figura (5.1) se representa la norma:

$$\langle \phi(q) | P^J P^N | \phi(q') \rangle. \quad (5.2)$$

Si miramos el panel (b) que se corresponde de nuevo con momento angular cero, observamos que, en este caso, para  $q = q' = 0$  el valor que se obtiene es 0.191. Este valor está lejos de ser la unidad ya que cuantos más proyectores se tengan en cuenta, menor va a ser el valor del solape de la norma. Para este momento angular vemos que las normas de ambas aproximaciones se parecen, aunque para el caso HFB+PNAMP son más anchas y están más extendidas en la diagonal.

Para momento angular  $J = 2$  (paneles (c) y (d)) las normas se hacen cero para el caso esférico. Observamos que las normas van decreciendo suavemente a lo largo de la diagonal ( $q=q'$ ) y las líneas  $q + q' = \text{constante}$ . En el caso HFB+AMP la distribución que se obtiene es casi simétrica respecto a la línea ( $q = -q'$ ), es decir, la parte oblate con la parte prolate, encontrando el máximo valor alrededor de la deformación de  $|60| \text{ fm}^2$ .

Para el caso HFB+PNAMP se encuentra una predominancia del lado prolate debido a que la norma es sensible al contenido de apareamiento presente en la función de onda. En este caso, el máximo valor se encuentra para una deformación prolate de  $100 \text{ fm}^2$ .

En los paneles (e) y (f) se muestran los contornos para momento angular  $J = 4$ . El comportamiento que se observa sigue la línea de lo descrito para  $J = 2$  pero con las diferencias que hemos apuntado más marcadas. Aparte de la asimetría oblate-prolate presente en el caso HFB+PNAMP, se observa que las normas para la aproximación HFB+AMP y momento angular mayor que cero están más extendidas. Esto es indicativo de que tenemos mezcla en el número de partículas y evidencia que se van a obtener correlaciones espurias para el caso HFB+AMP.

El análisis anterior puede extenderse, de alguna manera, al caso con dos coordenadas generadoras como se muestra a continuación en la figura (5.2). El número de coordenadas que se tiene en este caso para elementos no diagonales, nos llevaría a una representación como función de  $(q, q', \delta, \delta')$ . Como esto no es posible y ya hemos visto su comportamiento en el plano  $(q, q')$ , fijamos ahora dos deformaciones  $-80 \text{ fm}^2$  y  $100 \text{ fm}^2$ , que se corresponden con los valores en los que la energía es mínima (ver figura (4.3)) y tomamos  $q = q'$ . Para la otra variable, tomaremos tres valores que cubran el rango de deltas en el que estamos trabajando:  $\delta = 0.5$  (apareamiento débil);  $\delta = 2.0$  (apareamiento medio) y  $\delta = 3.5$  (apareamiento fuerte). Utilizamos las denominaciones de bajo, medio y alto, en relación al contenido de apareamiento presente en la solución autoconsistente en torno a esas deformaciones que son:  $\delta = 2.33$  para  $q = -80 \text{ fm}^2$  y  $\delta = 2.22$  para  $q = 80 \text{ fm}^2$ . Mientras que  $\delta'$  tomará todos los valores del rango seleccionado y estará representada en el eje de abscisas.

Esta representación nos va a permitir analizar el comportamiento del solape de las normas en función de la coordenada  $\delta$ , pero sin eliminar completamente la dependencia con la variable  $q$ , ya que es la coordenada dominante.

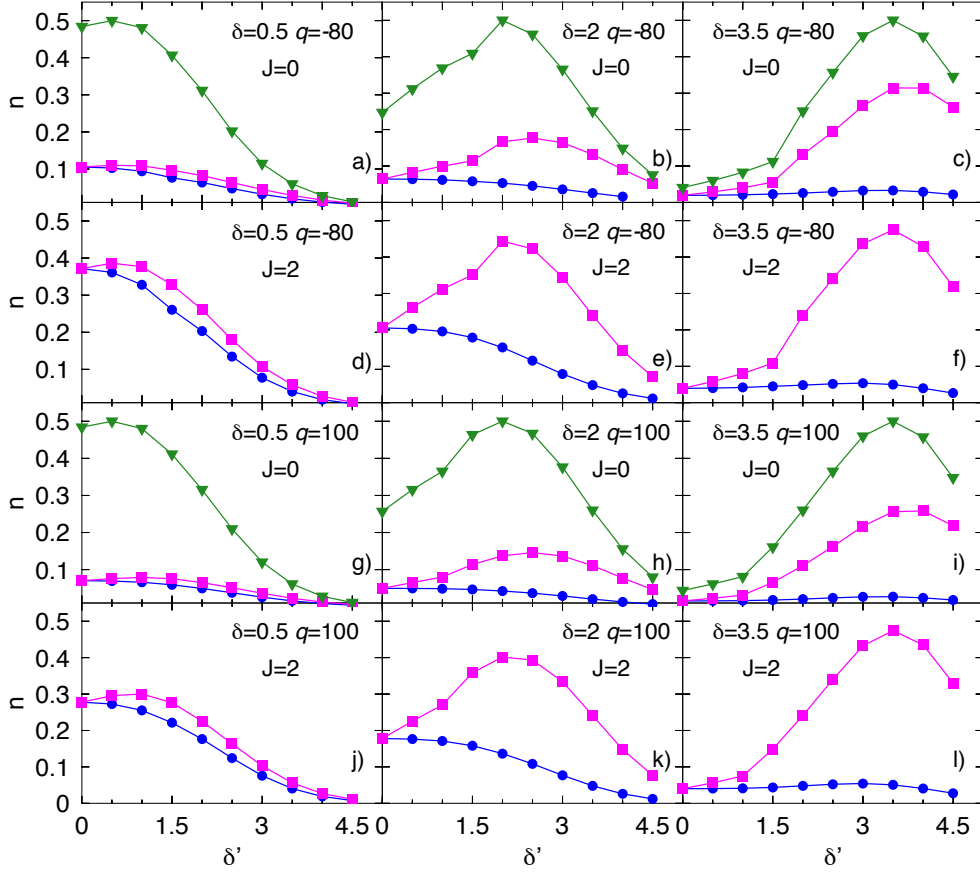
De nuevo, el objetivo es ver el efecto que tiene la proyección al número de partículas, por lo que se estudian las siguientes normas:

$$\langle \Phi(q, \delta) | P^J P^N | \Phi(q', \delta') \rangle \quad \text{HFB + PNAMP} \quad (5.3)$$

$$\langle \Phi(q, \delta) | P^J | \Phi(q', \delta') \rangle \quad \text{HFB + AMP} \quad (5.4)$$

$$\langle \Phi(q, \delta) | \Phi(q', \delta') \rangle \quad \text{HFB} \quad (5.5)$$

En la figura (5.2), la norma definida en (5.3) se representa en círculos azules, la que se corresponde con la ecuación (5.4) por cuadrados magentas y la de la expresión (5.5) por triángulos verdes.  $J$  va a tomar los valores 0 y 2 en los casos en los que se proyecte al momento angular.



**Figura 5.2:** Elementos de matriz del solape de la norma para el  $^{52}\text{Ti}$  para algunos casos del cálculo en 2D (ver el texto principal para una explicación más detallada). Los valores para la aproximación HFB+PNAMP se corresponden con los círculos azules, mientras que los cuadrados magentas son para la aproximación HFB+AMP. También se incluye, en triángulos verdes, la norma entre estados HFB (multiplicada por un factor 0.5).

Lo primero que observamos mirando la figura es que el caso HFB y HFB+AMP presentan un comportamiento gaussiano con centro en  $\delta' = \delta$  mientras que esto no ocurre para el caso HFB+PNAMP, donde las normas o decrecen o se mantienen más o menos constantes para valores crecientes de  $\delta'$ . Para entender esto último, podemos expandir las funciones de onda como autoestados del operador del número de partículas [58]:

$$|\Phi(q, \delta')\rangle = \sum_{\alpha' N'} C_{\alpha' N'}(q, \delta') |\alpha', N'\rangle. \quad (5.6)$$

La norma HFB+PNP entonces se define como:

$$\langle \Phi(q, \delta) | P^N | \Phi(q, \delta') \rangle = \sum_{\alpha} C_{\alpha N}(q, \delta) C_{\alpha N}(q, \delta'). \quad (5.7)$$

En la expresión anterior, para  $(q, \delta)$  fijo, el coeficiente  $C_{\alpha N}(q, \delta)$  es una constante (menor o igual a 1 por la normalización de los estados dados en la ecuación (5.6)), mientras que  $C_{\alpha N}(q, \delta')$  es máximo en  $\delta' = 0$ . Esto se debe a que, en ese punto, la función de onda intrínseca (5.6) es ya autoestado del número de partículas y la suma en  $N'$  se reduce a un solo sumando. De nuevo, la normalización a 1 de la función de onda hace que esos coeficientes  $C_{\alpha N}(q, \delta' = 0)$  sean mayores que para un  $\delta'$  arbitrario, donde la norma está repartida en más autoestados de  $\hat{N}$ .

Si comparamos las aproximaciones HFB+AMP y HFB+PNAMP como función de  $\delta$ , observamos que, independientemente del valor de  $q$ , las curvas de ambas aproximaciones, para un régimen de bajo apareamiento, van muy juntas y van divergiendo encontrando mayores diferencias para el caso de medio apareamiento y, este efecto, es todavía mayor para el  $\delta$  correspondiente a valores grandes de apareamiento (paneles de izquierda a derecha). Es en este caso, cuando la diferencia entre ellas es máxima, en el que la curva del caso HFB+AMP, para  $J = 0$ , guarda mayor similitud con la del caso HFB. Con respecto al momento angular, para el caso  $J = 2$ , las desviaciones entre las curvas HFB+AMP y HFB+PNAMP son mayores.

Si miramos como de diferentes son las curvas ahora en función de  $\delta'$  observamos lo siguiente: mientras que HFB+PNAMP es el caso que más rápido decrecen las normas según aumenta  $\delta'$ , el caso HFB+AMP coincide con HFB+PNAMP para valores pequeños de  $\delta'$ . La diferencia entre estas curvas va aumentando según  $\delta'$  aumenta hasta el valor máximo  $\delta' = \delta$ . A partir de este punto, la diferencia vuelve a decrecer y en el límite de  $\delta'$  coincidiría con el valor HFB+PNAMP pues estaríamos en límite semiclásico. Si  $\delta$  es pequeño la separación entre las curvas es mínima.

Concluimos que, las normas proyectadas a momento angular, se comportan de manera diferente con respecto al apareamiento si los estados se proyectan o no a buen número de partículas. Estas diferencias se producen en los valores de apareamiento que son típicos en los núcleos y van a verse reflejadas posteriormente en los observables calculados con el método GCM.

## 5.2. Distribución del número de partículas

En la aproximación HFB+AMP, para tratar el aspecto crucial de la no conservación del número de partículas, se introduce una corrección mediante los multiplicadores de Lagrange que hace que el número de partículas sea ajustado en promedio en las funciones de onda HFB. Cuando se utiliza el método GCM, de nuevo se hace una corrección mediante el término introducido en la ecuación (3.38). La cuestión que queremos abordar es cómo de acertada es la conservación del número de partículas para los estados  $|\Phi^{J,\sigma}\rangle$ . Para ello, analizaremos la distribución del número de partículas en la función de onda  $|\Phi^{J,\sigma}\rangle$ .

La probabilidad de encontrar un autoestado del operador  $\hat{N}$  con autovalor  $N$  en la función de onda  $|\Phi^{J,\sigma}\rangle$ , viene dada por:

$$\begin{aligned} W^N &= \sum_{\alpha N} |\langle \alpha N | \Phi^{J,\sigma} \rangle|^2 = \sum_{\alpha} \langle \Phi^{J,\sigma} | \alpha N \rangle \langle \alpha N | \Phi^{J,\sigma} \rangle \\ &= \langle \Phi^{J,\sigma} | P^N | \Phi^{J,\sigma} \rangle. \end{aligned} \quad (5.8)$$

De forma análoga, si tomamos  $W^{Z,N}$  nos dará la probabilidad de tener simultáneamente un autoestado de  $\hat{Z}$  y  $\hat{N}$ , con autovalores  $Z$  y  $N$  respectivamente. Con la definición de  $|\Phi^{J,\sigma}\rangle$ , dada en la ecuación 3.130, la expresión de la probabilidad vendrá dada en el marco de la ecuación de HW, por:

$$\begin{aligned} W^{Z,N} &= \langle \Phi^{J,\sigma} | P^N P^Z | \Phi^{J,\sigma} \rangle = \int dq dq' d\delta d\delta' \\ &\times f^{*N Z J, \sigma}(q, \delta) \langle \phi(q, \delta) | \hat{P}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q', \delta') \rangle f^{N Z J, \sigma}(q', \delta') \end{aligned} \quad (5.9)$$

La función de onda  $|\Phi^{J,\sigma}\rangle$  se encuentra normalizada a la unidad, y dado que:

$$\sum_N P^N = \sum_{\alpha N} |\alpha N \rangle \langle \alpha N| = 1, \quad (5.10)$$

encontramos que:

$$\sum_{N,Z} W^{Z,N} = 1. \quad (5.11)$$

La forma de proceder es la siguiente: se hace un cálculo GCM con HFB+AMP y se calcula el solape que aparece en la expresión (5.9) proyectando a diferentes valores de  $Z$  y  $N$ , yendo desde  $Z - 6$  hasta  $Z + 6$  y lo mismo para el número de neutrones  $N$ .

En el caso BCS, donde la función de onda que no es autoestado del número de partículas pero cuyo valor promedio es el adecuado, se tiene una distribución gaussiana centrada en dicho valor  $N$  ( $\langle \text{BCS} | \hat{N} | \text{BCS} \rangle = N$ ) [58].

En la tabla (5.1) se pueden ver los valores esperados de protones ( $Z_\lambda$ ) y neutrones ( $N_\lambda$ ), corregidos por los multiplicadores de Lagrange (3.145), que se obtienen del cálculo HFB+AMP en 1D y 2D. Para el  $^{52}\text{Ti}$ , los valores correctos que se deberían obtener, serían  $Z = 22$  y  $N = 30$ .

		$Z_\lambda$	$N_\lambda$
$0_1^+$	1D	21.819	29.934
	2D	21.789	29.907
$0_2^+$	1D	21.784	29.923
	2D	21.743	29.977
$0_3^+$	1D	21.707	29.955
	2D	21.865	29.873
$0_4^+$	1D	21.903	29.940
	2D	21.660	29.887

**Tabla 5.1:** Valores esperados del número de protones ( $Z_\lambda$ ) y de neutrones ( $N_\lambda$ ) corregidos con multiplicadores de Lagrange, para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$ ,  $0_3^+$  y  $0_4^+$  de las distribuciones mostradas en 5.3 (1D) y 5.4 (2D).

En las figuras (5.3) y (5.4), se muestra el caso de las funciones de onda HFB+AMP en el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ , cuando se tiene una o dos coordenadas respectivamente y para momento angular  $J = 0^+$  y sus cuatro autoestados más bajos. En el eje X están representados el número de protones y en el eje Y los neutrones. Para cada pareja de valores ( $Z, N$ ) se representa en 2D, como se puede ver en el código de colores de la derecha, la distribución de  $W(Z, N)$ . Esa distribución debería tener un comportamiento gaussiano con un máximo en  $Z = 22$  y  $N = 30$  para este núcleo.

Si miramos el caso unidimensional, figura (5.3), observamos que el estado fundamental  $0_1^+$ , panel de arriba a la izquierda, tiene toda su distribución de probabilidad centrada en el valor correcto del número de partículas y que se acerca bastante a la forma esperada. Sin embargo, no va a ocurrir lo mismo para los estados excitados.

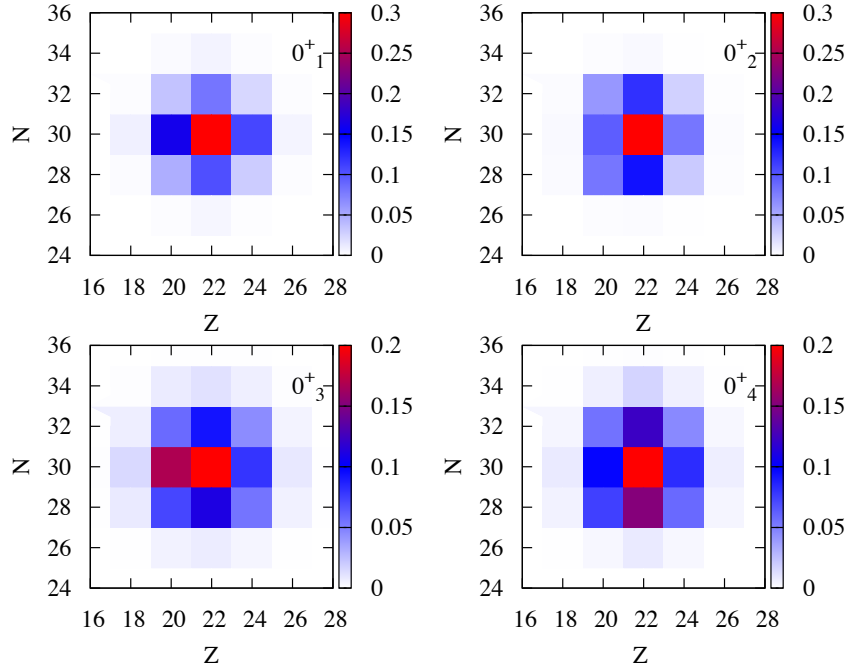
La distribución para el primer excitado  $0_2^+$ , panel superior derecho, tiene una distribución parecida al estado anterior, pero asimétrica con respecto a la línea  $N + Z = 52$ , por lo que dista de ser tipo gaussiana.

Para el siguiente estado excitado  $0_3^+$ , panel inferior izquierdo, tenemos una distribución más extendida en protones, encontramos una alta intensidad en el punto  $Z = 20$  y  $N = 30$ .

El estado excitado más alto  $0_4^+$ , panel inferior derecho, presenta una distribución más extendida ahora en protones, si bien está centrada en la posición



correcta, tenemos también alta intensidad en  $Z = 22$   $N = 28$  y, de nuevo, no se corresponde con un comportamiento puramente gaussiano.



**Figura 5.3:** Distribución del número de partículas en la aproximación HFB+AMP para el estado fundamental y los 3 primeros estados excitados con momento angular cero para el  $^{52}\text{Ti}$  en 1D.

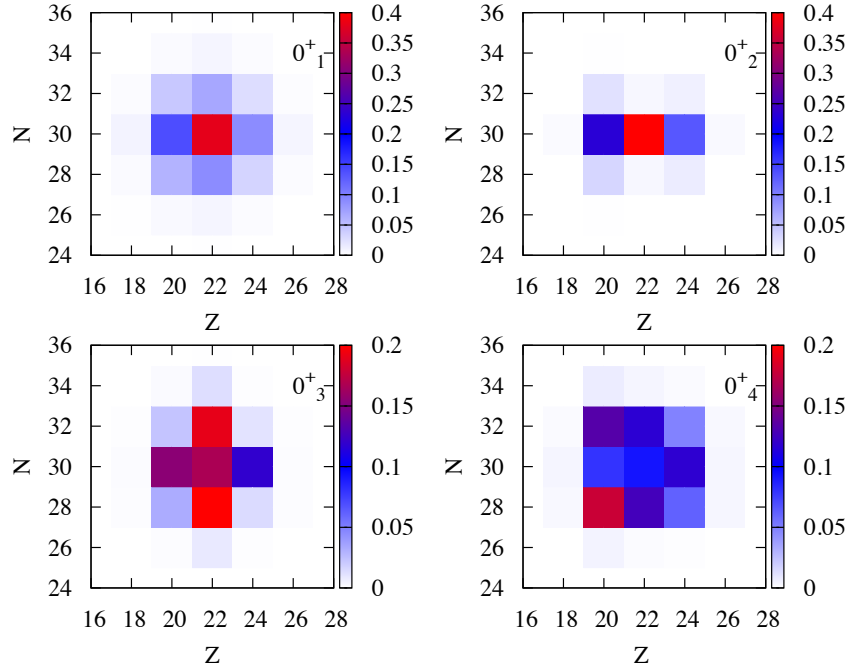
Vayamos al caso de dos dimensiones que se muestra en la figura (5.4). En este caso, la situación empeora y ninguna de las distribuciones que se obtiene para los diferentes estados, cumple la esperada distribución gaussiana.

El patrón que muestra el estado fundamental se parece a lo obtenido en el caso 1D, pero su intensidad es mayor en valor absoluto en la posición esperada  $Z = 22$  y  $N = 30$ . Prácticamente la mitad de la intensidad se concentra entre este punto y correspondiente a  $Z = 20$  y  $N = 30$ .

El estado  $0_2^+$  tiene una distribución claramente asimétrica extendida en la dirección de  $Z$ , donde se localiza prácticamente toda la intensidad.

El estado  $0_3^+$  se extiende a lo largo del número de neutrones y el máximo se encuentra para un valor incorrecto de  $N$ ,  $N = 28$  en lugar de  $N = 30$ . Además, el siguiente máximo tampoco es para el valor esperado que debería ser el correcto, sino que se da para  $N = 26$ .

La distribución del estado  $0_4^+$  es la que presenta la distribución más asimétrica de todas. La posición del máximo no se corresponde con el valor de  $N$  ni de  $Z$  que esperamos.



**Figura 5.4:** Distribución del número de partículas en la aproximación HFB+AMP para el estado fundamental y los 3 primeros estados excitados con momento angular cero para el  $^{52}\text{Ti}$  en 2D.

Es importante destacar que, pese a que los valores esperados del número de partículas cuando son corregidos por los multiplicadores de Lagrange se acercan bastante a lo que debería obtenerse, con diferencias en torno a 0.3 para protones y 0.1 para neutrones (se muestran en la tabla 5.1), las distribuciones que se obtienen no son correctas, llegando incluso a estar centradas para otros valores de  $N$  y  $Z$  que no son los propios del núcleo que se estudia. Podemos concluir, que la distribución del número de partículas en la aproximación HFB+AMP, tiene un comportamiento que dista de lo que se espera de forma teórica. El hecho de incluir las fluctuaciones de apareamiento no es el origen de dichas distribuciones irregulares, ya que como hemos visto, cuando solo se considera la deformación cuadrupolar, se encuentran distribuciones anómalas también.

Como síntesis global de este capítulo, podemos decir que se ha abordado, desde dos perspectivas diferentes, el tema de la importancia de la proyección al número de partículas, encontrando que es fundamental su implementación para describir de forma adecuada las propiedades atómicas del núcleo.

# Capítulo 6

## Superficies de energía potencial y espectros con $q$ y $\delta$

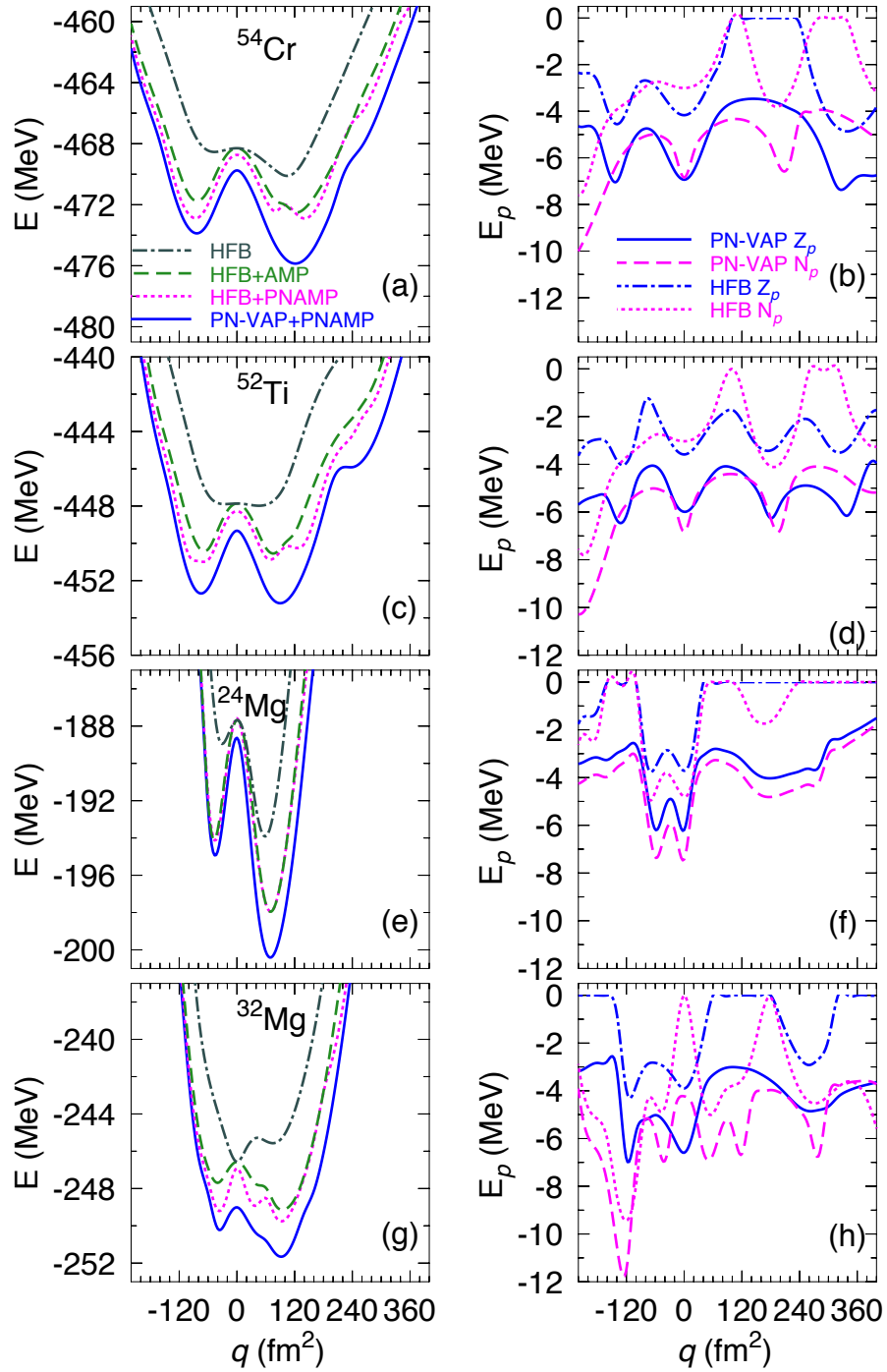
### 6.1. Introducción

En este capítulo se discuten las PES (secciones 6.2 y 6.3) y los espectros de excitación (sección 6.4), de manera análoga a lo que ya se hizo en el capítulo 4 para el  $^{52}\text{Ti}$ , pero extendido a otros núcleos. Éstos, conforman un escenario de casos diferentes y representativos a la vez, lo que hace atractivo el estudio de todos ellos. Además, va a permitir comprobar si las conclusiones que se obtuvieron para el Titanio se pueden extrapolar a otros casos.

### 6.2. Superficies de energía potencial 1D

Como guía para los cálculos más sofisticados en 2D, presentamos primero las curvas de energía potencial cuando solo es tomada en cuenta la deformación, figura (6.1). Su visualización servirá como guía para interpretar las superficies bidimensionales de la siguiente sección y para entender resultados que serán discutidos posteriormente.

Se muestran a la izquierda las curvas para los núcleos  $^{54}\text{Cr}$ ,  $^{52}\text{Ti}$ ,  $^{24}\text{Mg}$  y  $^{32}\text{Mg}$  (de arriba a abajo) con los dos tipos de función de onda utilizados y diferentes proyecciones. En la parte derecha de dicha figura y al lado de su correspondiente potencial, se muestra el apareamiento que se obtiene para protones y neutrones.



**Figura 6.1:** En la parte izquierda podemos ver los pozos de potencial en función solamente de la variable  $q$  para el <sup>54</sup>Cr, <sup>52</sup>Ti, <sup>24</sup>Mg y <sup>32</sup>Mg (de arriba a abajo) en diferentes aproximaciones, ver leyenda del panel (a), y para  $J = 0$  en los casos en los que se proyecta a momento angular. A la derecha de cada núcleo se muestran las energías de apareamiento para los dos tipos diferentes de funciones de onda, ver leyenda del panel (b).

Las superficies del Cromo presentan todas dos mínimos, uno prolata y otro oblate, siendo la curva HFB la más plana y la que se encuentra a una energía más alta. Si se proyecta a momento angular (HFB+AMP) la curva de potencial se hace un poco más profunda y los mínimos se desplazan ligeramente a deformaciones mayores. La proyección con ambos operadores (HFB+PNAMP) hace que todavía se gane más energía, excepto en los puntos en los que las correlaciones de apareamiento son cero. El caso PN-VAP+PNAMP es para el que se tiene la curva más profunda, el mínimo prolata aparece más marcado y se encuentra un "hombro" en  $q = 240 \text{ fm}^2$  que, en este caso, va a estar producido por un cruce de niveles.

En la aproximación PN-VAP+PNAMP para el núcleo  $^{52}\text{Ti}$  encontramos una coexistencia de formas oblate y prolata con un hombro prolata superdeformado. En el núcleo  $^{24}\text{Mg}$  observamos un mínimo deformado profundo prolata y otro, aproximadamente a 5 MeV por encima, oblate. El  $^{32}\text{Mg}$  presenta una superficie más plana, con un mínimo deformado prolata y a dos MeV de energía por encima, otro mínimo oblate.

Las curvas que se obtienen a nivel de campo medio son las que más difieren con respecto a las de las otras aproximaciones, obteniendo incluso una forma esférica para el  $^{52}\text{Ti}$ . Sin embargo, las correspondientes a las aproximaciones HFB+AMP, HFB+PNAMP y PN-VAP+PNAMP, muestran formas parecidas entre sí, aunque es esta última la que proporciona mayor ganancia de energía en todos los casos.

En la parte derecha de la misma figura, podemos ver el apareamiento de forma separada para neutrones y protones correspondiente a funciones de onda intrínsecas tipo PN-VAP o HFB como función de la deformación, consultar la leyenda del panel (b).

Para el  $^{54}\text{Cr}$ , el apareamiento que viene de la aproximación de HFB se hace cero tanto para protones ( $q = 100\text{-}240 \text{ fm}^2$ ) como para neutrones ( $q = 100\text{-}120, 280\text{-}340 \text{ fm}^2$ ). El mínimo prolata se encuentra en una deformación de  $120 \text{ fm}^2$ , en la que ambas correlaciones han colapsado a cero. Para el caso PN-VAP, el apareamiento oscila, de media, entre de 4 y 7 MeV aunque, para deformaciones muy oblates, llega hasta los 10 MeV.

En el  $^{52}\text{Ti}$ , obtenemos un comportamiento oscilante del apareamiento en función de la deformación. Análogamente que para el núcleo anterior, en la aproximación HFB se da un colapso de las correlaciones de apareamiento, en este caso para los neutrones, en dos deformaciones que coinciden con las mismas en las que se localizan el mínimo prolata y el hombro superdeformado. La misma tendencia vista para los dos núcleos anteriores se observa en los Magnesios. Por una lado, la energía de apareamiento es cero en las deformaciones en las que se obtiene el mínimo HFB y por otro, tenemos valores de

apareamiento mayores que no llegan a colapsar nunca, para las funciones PN-VAP. Merece la pena destacar el caso del  $^{24}\text{Mg}$ , que tiene el mismo número de protones que neutrones y, sin embargo, se puede ver que las correlaciones de apareamiento obtenidas en ambos canales es diferente, lo que se explica gracias al efecto anti-apareamiento de Coulomb (*Coulomb anti-pairing effect*) [104].

### 6.3. Superficies de energía potencial 2D

En esta sección, estudiamos las curvas de energía potencial, pero ahora con respecto a los dos grados colectivos de libertad para una selección de núcleos. A la deformación cuadrupolar, del apartado anterior, se suman ahora las fluctuaciones en el apareamiento, incluidas al constreñir en la nueva coordenada  $\delta$ , como se mostró en la sección (4.4).

En todas las superficies de energía en 2D mostradas a continuación, los valores para  $q$  están en  $\text{fm}^2$  y la energía en MeV. Asimismo, se puede ver la solución autoconsistente correspondiente a cada una de ellas como una línea de puntos.

Aparte del interés intrínseco de las PES, nos van a mostrar las diferencias que surgen al utilizar una u otra de las aproximaciones estudiadas y van a ayudarnos a entender e interpretar los espectros de excitación que veremos en la siguiente sección.

#### 6.3.1. PES con proyección a diferente momento angular

En esta sección queremos analizar, principalmente, como son las superficies de energía cuando se proyecta a diferente momento angular. No obstante, también se van a explicar algunas superficies en las mismas aproximaciones que vimos con anterioridad para el Titanio. Para hacer este análisis hemos elegido el núcleo  $^{54}\text{Cr}$ . Sus superficies se muestran en la figura (6.2).

Empezamos por el caso HFB, panel (a). La superficie tiene un mínimo prolata a  $100 \text{ fm}^2$  y otro menor oblate a  $60 \text{ fm}^2$ . El mínimo prolata se extiende en el eje Y hasta zonas donde las correlaciones de apareamiento se van a cero. Observamos que para valores de  $q$  mayores que  $50 \text{ fm}^2$ , las equipotenciales son paralelas al eje de las deltas (eje y) para  $\delta$  pequeños y perpendiculares para valores grandes de  $\delta$ . Ese valor de delta, para el que se da el cambio, se encuentra alrededor de  $\delta_{max} = 2.5$  para la región de las  $q$  donde es energéticamente interesante, esto es, donde encontramos el mínimo del potencial y

alrededores. Esto nos indica que, si fijamos el  $q$ , para valores de  $\delta < \delta_{max}$  cambiar el apareamiento de una función de onda no cuesta mucha energía, teniendo un potencial blando en esa dirección. Sin embargo, superado ese valor de  $\delta_{max}$ , ese potencial se vuelve duro y moverse en la dirección  $\delta$  implica un gran coste de energía. Si miramos ahora lo que ocurre cerca de la configuración esférica, encontramos un valle alrededor de  $\delta = 2.5$  donde la energía crece si uno trata de aumentar o disminuir las correlaciones de apareamiento. Esto está relacionado con el hecho de que alrededor de la forma esférica la configuración es muy pura, teniendo cuatro protones en la subcapa  $f_{7/2}$  y dos neutrones en la  $p_{3/2}$ . Las otras subcapas están lejos en energía, de modo que modificar el apareamiento va a implicar un coste de energía grande.

A continuación, analizamos el efecto de proyectar al número de partículas en aproximación VAP, panel (b). Observamos que las equipotenciales se desplazan a valores más altos de  $\delta$ . En concreto el mínimo prolata se desplaza hasta  $\delta = 2$ . Los mínimos ahora están más pronunciados y son un poco más profundos.

Pasamos ahora a ver el efecto puramente de la proyección del momento angular (AMP) para momento angular  $J=0$ . En el panel (c) se muestran los resultados para el caso HFB+AMP sin ningún tipo de corrección. En este caso, al igual que para el puro HFB y contrariamente al caso PN-VAP, el mínimo del potencial se extiende hasta  $\delta = 0$ , lo que nos está indicando que es necesario restaurar la simetría del número de partículas para incluir, de forma correcta, las correlaciones de apareamiento.

Dado que no tenemos en promedio el número de partículas, se hace a cada punto de la red la corrección al número de partículas dada por los multiplicadores de Lagrange:

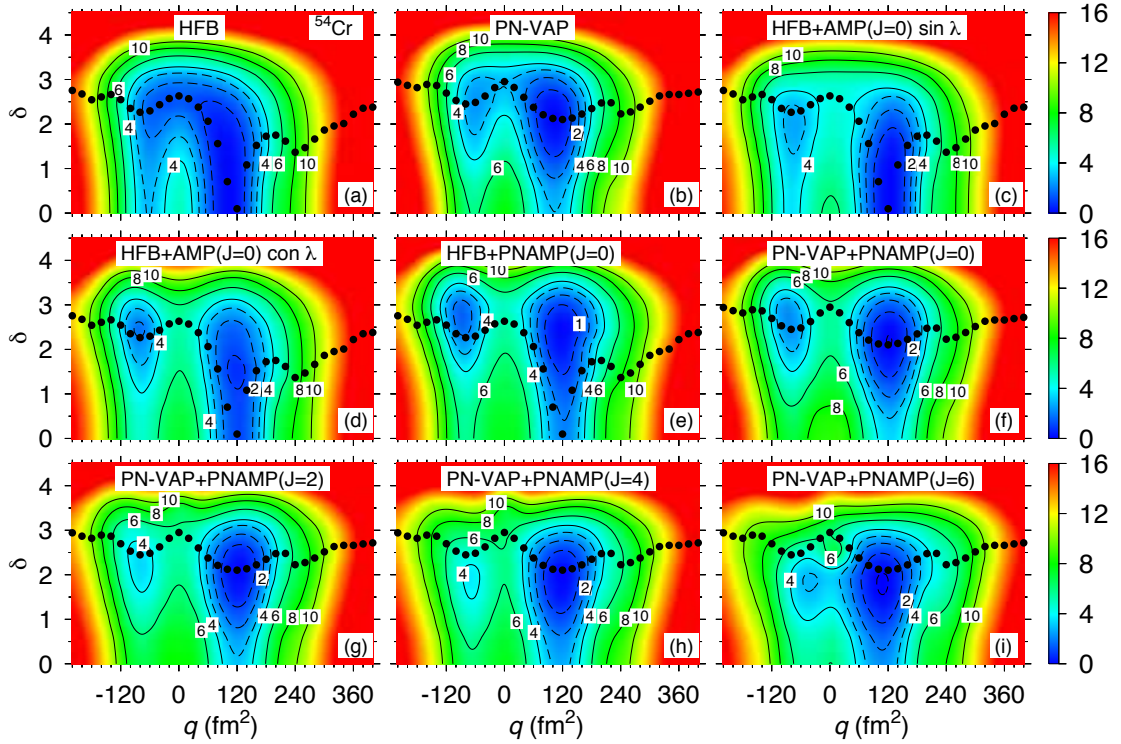
$$E_{corr} = E^I + \lambda_Z(N_{Z_0} - N_Z) + \lambda_N(N_{N_0} - N_N), \quad (6.1)$$

donde  $\lambda_Z$  y  $\lambda_N$  son los multiplicadores de Lagrange para protones y neutrones respectivamente;  $E^I$  la energía proyectada a momento angular;  $N_{Z_0}$  y  $N_{N_0}$  es el número exacto de protones y neutrones; y  $N_Z$   $N_N$  el número de protones y neutrones que se obtienen en la proyección.

Esta corrección con los multiplicadores de Lagrange es implementada para obtener los estados del espectro, ya que es introducida en la ecuación de HW (3.145), por lo que es interesante visualizar la superficie asociada ya corregida que se muestra en el panel (d).

Esta corrección principalmente tiene el efecto de desplazar los mínimos a zonas con correlaciones de apareamiento distintas de cero, haciendo que este tipo de superficies sean muy parecidas a las de la aproximación HFB+PNAMP.

En este caso, pasamos de tener el mínimo a cero correlaciones de apareamiento, a tenerlo en  $\delta = 1.5$ .



**Figura 6.2:** Superficies de energía potencial para el  $^{54}\text{Cr}$  en el plano  $(q, \delta)$ . En líneas de puntos se pueden ver los contornos de 0 hasta 3 MeV de 1 MeV cada uno. En línea continua los contornos desde 4 a 10 MeV en intervalos de 2 MeV. A la derecha se puede ver la escala de colores en MeV. Cada superficie ha sido normalizada a cero de forma independiente con respecto a su mínimo de energía.

Podemos ver el efecto de ambas proyecciones a la vez en las curvas HFB+PNAMP (e) y PN-VAP+PNAMP (f). Si comparamos el caso PN-VAP con el PN-VAP+PNAMP podemos ver el efecto de la proyección al momento angular cuando ya se ha tenido en cuenta la proyección del número de partículas. Vemos que los mínimos se desplazan a valores un poco mayores de  $q$  y se hacen más profundos, sin embargo no se encuentra ningún movimiento en la dirección de  $\delta$ . Si comparamos ahora ambas superficies (HFB+PNAMP versus PN-VAP+PNAMP) entre sí, vemos que presentan un comportamiento cualitativamente similar, sin embargo, los mínimos para el primero de los casos son mucho más blandos, en especial el prolato, para valores pequeños del  $\delta$ .



Por último, en las figuras (g) (h) y (i), se muestran los potenciales dentro de la aproximación PN-VAP+PNAMP para momento angular creciente  $J = 2$ ,  $J = 4$  y  $J = 6$  respectivamente.

Antes de discutir estas superficies, es conveniente hacer una aclaración. En la aproximación semiclásica de Cranking [58] se debería añadir el término  $-\omega J_x$  a la ecuación variacional (3.40), de manera que ésta quedaría:

$$\frac{\delta}{\delta\Phi}\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle - \omega\frac{\delta}{\delta\Phi}\langle\Phi|\hat{J}|\Phi\rangle = 0 \quad (6.2)$$

La frecuencia de Cranking es determinada por la relación  $\langle\hat{J}\rangle = \sqrt{J(J+1)}$  y  $\omega$  es el multiplicador de Lagrange que asegura que el valor medio del momento angular sea  $\langle\Phi|\hat{J}|\Phi\rangle = J$ . En este caso, este término no es tenido en cuenta, por lo que estamos describiendo el caso  $J = 0$ , ya que como nuestras funciones de onda no rompen simetría temporal la condición  $\langle\hat{J}\rangle = 0$  siempre se cumple. Para un estudio más completo este término debería ser incluido y calculado para cada valor de  $J$ . El hecho de imponer esa condición a las funciones de onda intrínsecas, que forman la malla de puntos con los que se realizan los cálculos (en una o dos dimensiones), implica que la energía va a ser minimizada para un momento angular óptimo igual a cero. Esto supone que tenemos una función de onda tipo PN-VAP optimizada para el número de partículas correcto y momento angular  $J = 0$ , de tal manera que al permitir las fluctuaciones y hacer el generador de coordenadas, el valor de la energía para  $J = 0$  no va a verse afectado mucho mientras que las de los estados con diferente  $J$  sí se van a ver corregidas. Esto hace que las variaciones en las energías de excitación sean más importantes para  $J$ s más altos cuando se hace el PN-VAP, como podrá apreciarse en los espectros de la siguiente sección.

Volviendo a los potenciales, observamos en estos paneles, como al proyectar para diferentes valores del momento angular las superficies se van achatando para valores más altos del momento angular. Esto supone que el mínimo de la energía se encuentra en valores más bajos de  $\delta$ . Lo que indica que si se aumenta el momento angular, el sistema tiende a tener energías de apareamiento menores. Además, podemos ver que el mínimo oblate se desplaza ligeramente hacia el caso esférico.

### 6.3.2. PES para núcleos con diferente grado de colectividad

Esta sección está dedicada a las superficies de contorno de la energía para núcleos con diferente grado de colectividad. Se estudian las superficies de energía potencial para los isótopos del Magnesio  $^{32}\text{Mg}$ ,  $^{24}\text{Mg}$  y para los isótopos del Calcio, que tienen un cierre de capa en  $Z=20$ ,  $^{50}\text{Ca}$ ,  $^{52}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$ .

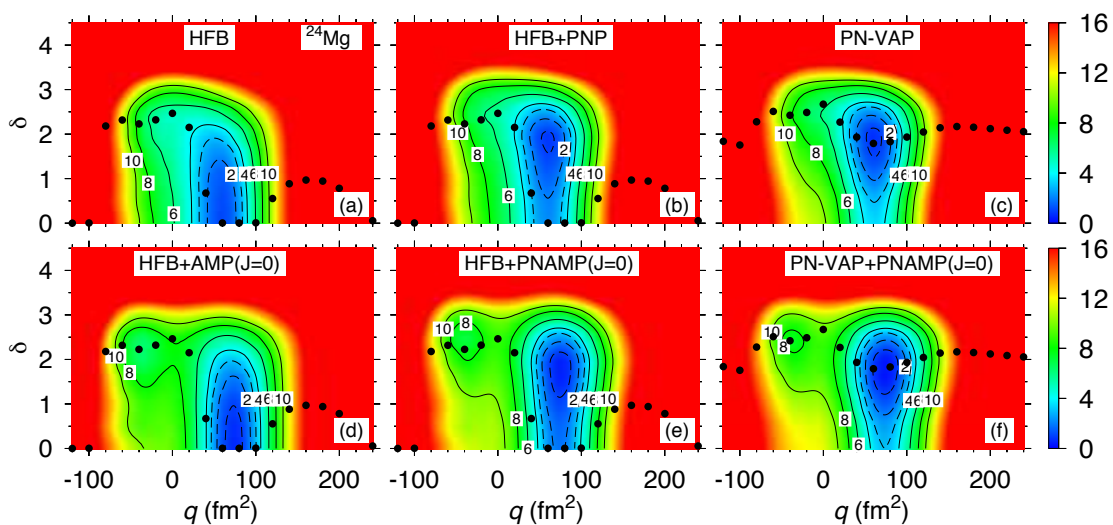


Figura 6.3: Superficies de energía equipotencial para el  $^{24}\text{Mg}$ .

En la figura (6.3) podemos ver los potenciales para el  $^{24}\text{Mg}$ . Presenta, de todos los núcleos analizados, los potenciales más estrechos y con mayor pendiente de todos. Tiene un máximo prolata muy profundo y otro mínimo oblate a varios MeV de energía por encima.

La solución autoconsistente, para los casos de HFB, tiene cero correlaciones de apareamiento para las deformaciones 60, 80 y  $100\text{ fm}^2$ . Además, si la comparamos con la que se obtiene para el caso PN-VAP, vemos que para deformaciones prolates mayores se obtienen valores más bajos para las correlaciones. Es importante notar que en los casos en los que los puntos no pasen por los mínimos no tendremos autoconsistencia.

Cuando no se tiene en cuenta la proyección al número de partículas, casos HFB y HFB+AMP, paneles (a) y (d), el mínimo se encuentra para  $\delta = 0$ . Si es tenida en cuenta, el mínimo se desplaza hasta  $\delta = 1.5$  para los casos HFB+PNP y HFB+PNAMP, paneles (b) y (e), o  $\delta = 2$  si se utilizan funciones intrínsecas tipo PN-VAP, paneles (c) y (f).

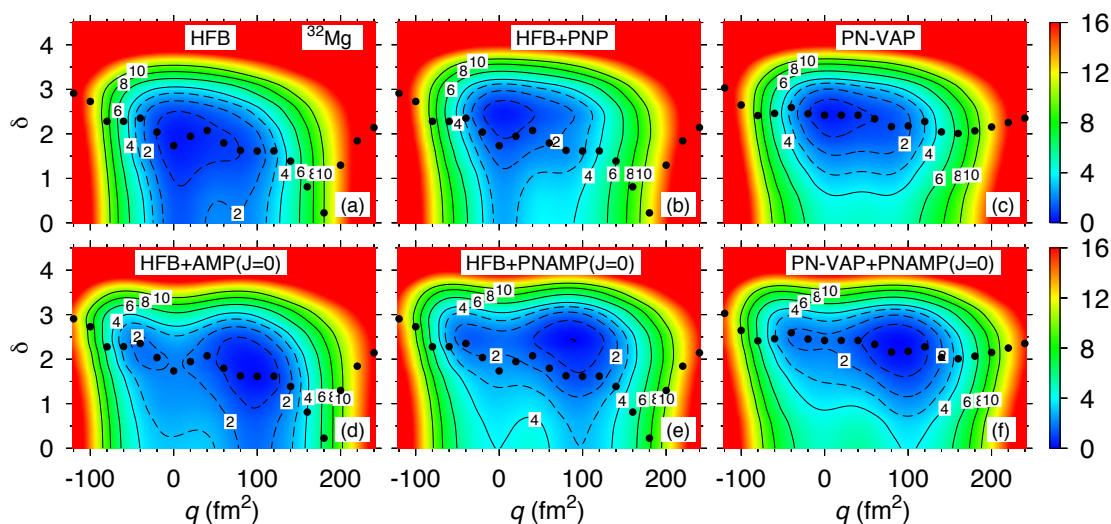
Si no se tiene en cuenta la proyección del momento angular, casos de fila superior de la figura, el mínimo absoluto se da para una deformación de 60

$\text{fm}^2$  mientras que si es tenida en cuenta, fila inferior de la misma figura, se produce un desplazamiento hasta  $q=80 \text{ fm}^2$ .

El  $^{32}\text{Mg}$  se muestra en la figura (6.4). Si comparamos estas superficies con respecto a las superficies del  $^{24}\text{Mg}$  observamos que las primeras son más anchas y más planas en la dirección  $q$  pero, sin embargo, presentan mayor pendiente en la coordenada  $\delta$ .

Cuando no se hace la proyección al momento angular (fila superior) presenta una estructura esférica, con el mínimo en  $q = 0$ . Las mismas ideas explicadas anteriormente para los otros núcleos aplican en este caso también.

Si nos centramos en la aproximación más completa, PN-VAP+PNAMP (panel f) se observan dos mínimos deformados, el más profundo para una deformación de  $100 \text{ fm}^2$  y  $\delta = 2$ . El otro es oblate para una deformación de  $-40 \text{ fm}^2$  y  $\delta = 2.5$  encontrándose aproximadamente a una energía de 2 MeV por encima del primero.



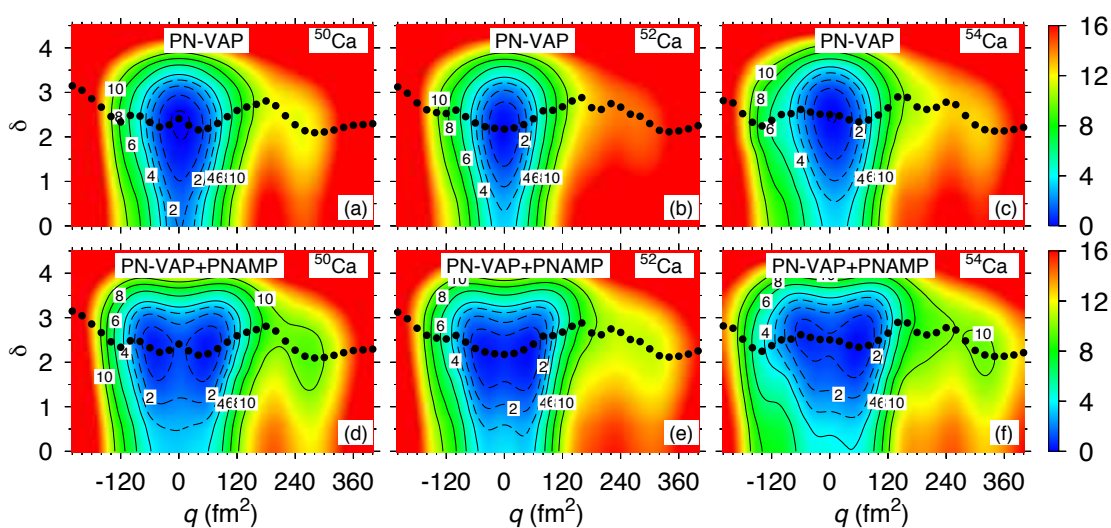
**Figura 6.4:** Superficies de energía equipotencial para el  $^{32}\text{Mg}$ .

Para acabar con esta sección de superficies equipotenciales, se muestran en la figura (6.5) las correspondientes a los isótopos del Calcio:  $^{50}\text{Ca}$   $^{52}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$  sólo para el caso PN-VAP y su caso proyectado PN-VAP+PNAMP.

Es posible, por medio de esta gráfica, estudiar la evolución de las superficies equipotenciales como función del número de neutrones. Si miramos la fila de arriba, caso PN-VAP, todos tienen un potencial esférico debido al cierre de capa para  $Z=20$ . Los contornos crecen rápido en la dirección de  $q$  dando potenciales con gran pendiente aunque son bastante suaves en la coordenada  $\delta$ , por debajo del valor  $\delta = 3.5$ . Según aumenta la colectividad, uno esperaría

obtener en la dirección  $q$ , potenciales que pasarían de más estrecho a más ancho. Sin embargo, esto no es lo que se observa para el caso del  $^{52}\text{Ca}$ . Este hecho está relacionado con un cierre de subcapa para  $N=32$ , tema que se volverá a tratar más tarde.

Si miramos las filas inferiores para los casos PN-VAP+PNAMP con  $J = 0$  vemos el efecto que tiene la proyección del momento angular y que ya ha sido notado con anterioridad. El potencial se suaviza en la dirección  $q$  produciendo una estructura de dos mínimos, uno oblate y otro prolate en  $60 \text{ fm}^2$  y  $-60 \text{ fm}^2$  respectivamente.



**Figura 6.5:** Superficies equipotenciales para el  $^{50}\text{Ca}$ ,  $^{52}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$  (de izquierda a derecha) y en aproximaciones PN-VAP (fila de arriba) y PN-VAP+PNAMP (fila de abajo) para  $J = 0$ .

## 6.4. Espectros

En esta sección se van a analizar los espectros de los núcleos cuyas PES se han estudiado en la sección anterior. Los espectros se han calculado siguiendo las mismas indicaciones que se explicaron en la subsección 4.5.3. De nuevo, para evaluar el impacto de las fluctuaciones de apareamiento, los estados de los espectros se representan en azul y rojo, según se haya tomado una variable (1D) o dos (2D) respectivamente.

Para entender los espectros hay que hacer las siguientes consideraciones. Cuanto más deformado sea un objeto, mayor va a ser su momento de inercia, lo que conlleva un espectro más comprimido, por lo que para interpretar el es-

pectro habrá que tener en cuenta si el objeto se hace más o menos deformado cuando se exploran más grados de libertad. Además, para la restauración del momento angular, tendremos estados con momento angular distinto de cero, que estarán energéticamente más altos de lo que deberían pues la aproximación tipo PAV (que es la que está siendo usada aquí) presenta un momento de inercia menor que el que se obtendría en una aproximación tipo AM-VAP [58] siendo éste uno de los motivos que hace que los espectros se estiren. El efecto contrario lo va a dar el apareamiento. Para una misma deformación, a mayor apareamiento se obtiene un núcleo más superfluido y por tanto, el momento de inercia asociado es menor. Esto quiere decir que cuando obtengamos soluciones con más apareamiento (caso PN-VAP frente a HFB) los espectros van a ser más estirados.

### 6.4.1. Espectros para el $^{54}\text{Cr}$

Empezamos analizando los espectros que se obtienen para el  $^{54}\text{Cr}$ , figura (6.6).

Si tomamos el espectro que viene de la aproximación PN-VAP+PNAMP (espectro de la izquierda de la figura) y comparamos el caso 1D con el 2D, observamos que el segundo se encuentra más comprimido que el primero y esta bajada de energía aumenta a mayor momento angular y para estados más excitados. Para aclarar este punto, conviene hacer las siguientes aclaraciones. Una aproximación VAP al momento angular, de acuerdo a la expansión a primer orden de Kamlah [105], se haría de la siguiente manera: la función de onda intrínseca  $|\Phi\rangle$ , se determinaría minimizando la energía:

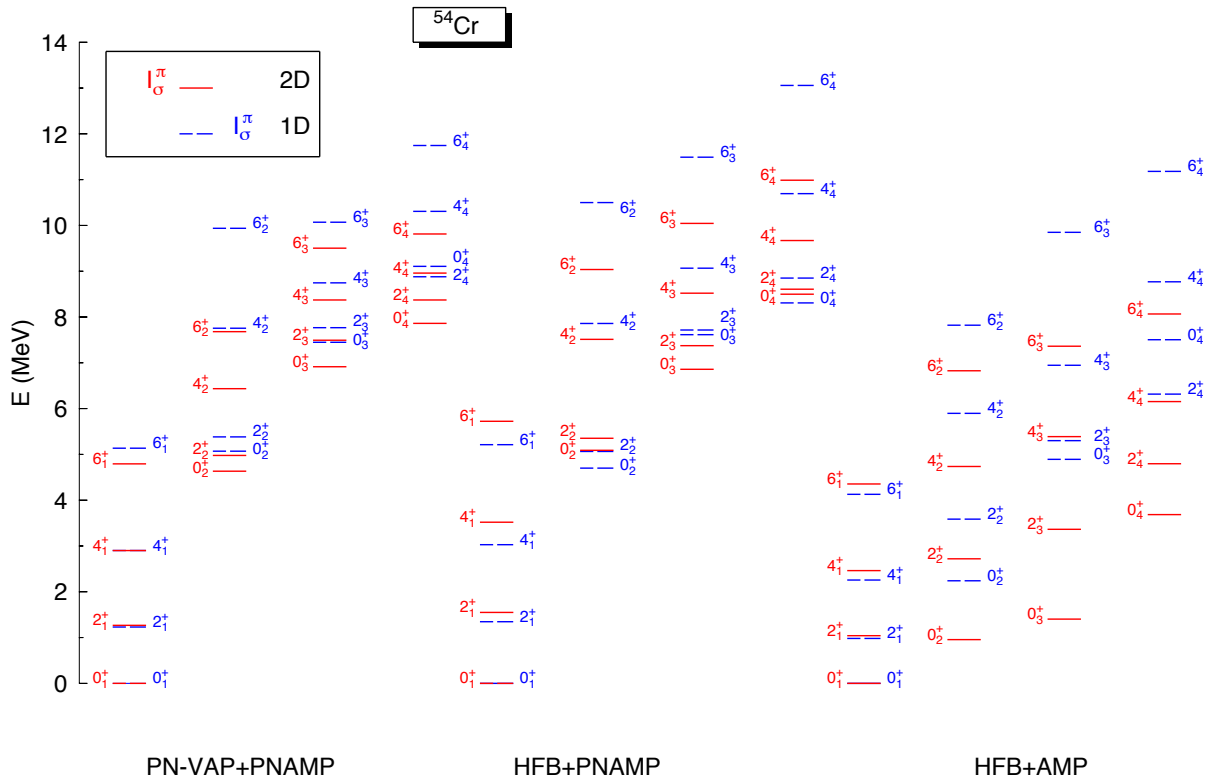
$$E' = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle - \omega \langle \Phi | \hat{J}_x | \Phi \rangle. \quad (6.3)$$

Mientras que  $\omega$  estaría determinado al constreñir  $\langle J_x \rangle = \sqrt{J(J+1)}$ . La energía entonces, vendrá dada por:

$$E^J = \frac{\langle \Phi | \hat{H} P^J | \Phi \rangle}{\langle \Phi | P^J | \Phi \rangle} \quad (6.4)$$

Esta prescripción aplica para las tres aproximaciones utilizadas. Para el caso  $J = 0$  se cumple que:  $\langle \Phi | \hat{J}_x | \Phi \rangle = 0$ . Para momento angular distinto de cero, esto ya no es cierto porque nuestra función de onda no rompe inversión temporal, de modo que ya no va a satisfacer la ligadura del momento angular. Esto implica que nuestras aproximaciones favorecen los estados con  $J = 0$  porque, en este caso, estamos haciendo una aproximación VAP mientras que para otros momentos angulares estamos haciendo una proyección PAV. Desde esta perspectiva, es obvio que la calidad de la aproximación disminuye con

valores crecientes del momento angular. Por tanto, estas predicciones teóricas que dan espectros muy estirados, esperaríamos que mejoraran si se permitiera la ruptura de la simetría de inversión temporal [106].



**Figura 6.6:** Espectros de excitación para el  $^{54}\text{Cr}$ , obtenidos tras implementar un generador de coordenadas a las tres aproximaciones que se vienen estudiando y que están indicadas en la parte inferior de la figura. El color azul o línea discontinua se corresponde con un cálculo unidimensional, mientras que el rojo o línea continua es para uno bidimensional. Las energías están normalizadas al estado fundamental y los espectros no han sido agrupados en bandas en base a algún observable, sino que han sido numerados según el orden en el que se han calculado teóricamente con  $\sigma$  creciente para estados más excitados.

El hecho de que el valor óptimo de la función intrínseca se dé para  $J = 0$ , se traduce en que si permitimos las fluctuaciones en el sistema y la mezcla de configuraciones con otras funciones de onda, no sólo con la autoconsistente, las correcciones que vamos a encontrar para la energía del estado  $J = 0$  van

a ser pequeñas. Sin embargo, para los demás estados excitados tendremos un cambio apreciable.

Por otro lado, la autoconsistencia, también juega un papel importante pues, de alguna forma, va a limitar la ganancia de energía que se va a obtener cuando se pasa de un cálculo 1D a otro 2D al estar en el segundo caso contenidos los valores del primero y hacer uso del principio variacional. Se puede ver, paneles (f) y (i) de la figura (6.2), como los puntos de la solución autoconsistente van a seguir un camino que pasa por los mínimos y puntos de silla de la superficie bidimensional para el caso en el que el momento angular es  $J = 0$  mientras que esto no ocurre para el caso  $J = 6$ .

Todo esto se traduce en que el método GCM baja la energía de los estados con momento angular alto ( $2^+$ ,  $4^+$ ,  $6^+$ ) más que la del fundamental ( $0^+$ ), lo mismo que para estados que no pertenezcan a la banda Yrast ( $\sigma$  mayor que uno), cuando se hace un análisis bidimensional frente al unidimensional. Esto se puede apreciar en los valores absolutos de los niveles de energía del espectro recogidos en la tabla (6.1).

Podríamos decir que, considerar un grado de libertad adicional, *compensa* de manera parcial el problema ya mencionado acerca de una proyección VAP para momento angular igual a cero y otra PAV para cuando es distinto de cero. En realidad, lo que estamos haciendo al tener en cuenta otro grado de libertad, es una aproximación VAP restringida (restricted variation after projection, RVAP) para el momento angular [17].

A continuación, nos centramos en el espectro que se obtiene si se utiliza la aproximación HFB+PNAMP (espectro del medio de la figura (6.6)). El aspecto general es similar al que se observa para la aproximación anterior, lo cual es consistente con el hecho de que las superficies de energía de estos dos casos también tenían un gran parecido. Sin embargo, el comportamiento cuando se incluye el segundo grado de libertad, de nuevo, es diferente en este caso que lo que se obtenía en la aproximación PN-VAP+PNAMP. Se observa que varios de los estados 2D se encuentran por debajo de los correspondientes 1D y, en particular, la banda del fundamental está más estirada en 2D que en 1D. La razón por la que esto ocurre es debido a la falta de autoconsistencia en esta aproximación, que puede verse en los paneles (b) y (e) de la figura (6.2). Se observa que la solución autoconsistente no pasa por el mínimo que se obtiene en 2D, de modo que ahora el fundamental ya no tiene por qué encontrarse casi para el mismo valor, pudiendo experimentar una ganancia en la energía considerable.

Esto, unido a que una exploración de las fluctuaciones de apareamiento incluye correlaciones que conllevan un momento de inercia asociado menor, hace que los espectros mostrados en esta aproximación se alarguen para el caso

		$0_1^+$	$0_2^+$	$0_3^+$	$0_4^+$
PN-VAP+PNAMP	1D	-476.636	-471.566	-469.188	-467.530
	2D	-476.865	-472.232	-469.951	-469.004
HFB+PNAMP	1D	-474.985	-470.285	-467.371	-466.677
	2D	-475.809	-470.720	-468.951	-467.311
HFB+AMP	1D	-473.522	-471.282	-468.630	-466.018
	2D	-474.137	-473.182	-472.734	-470.452
		$4_1^+$	$4_2^+$	$4_3^+$	$4_4^+$
PN-VAP+PNAMP	1D	-473.735	-468.881	-467.890	-466.329
	2D	-474.010	-470.430	-468.493	-467.906
HFB+PNAMP	1D	-471.957	-467.126	-465.919	-464.291
	2D	-472.290	-468.297	-467.289	-466.139
HFB+AMP	1D	-471.266	-467.626	-466.576	-464.753
	2D	-471.675	-469.401	-468.749	-467.984

**Tabla 6.1:** Energías absolutas (en MeV) para los cuatros estados más bajos del  $^{54}\text{Cr}$  para dos momentos angulares distintos; parte superior  $J = 0$  y parte inferior  $J = 4$ .

en que se tienen en cuenta dos dimensiones.

Pese a que el caso HFB+PNAMP en 2D, según se incluyen más correlaciones y se permite la mezcla de configuraciones, se va acercando a la solución PN-VAP+PNAMP, podemos decir a la vista de los espectros, que no la alcanza a un nivel suficiente.

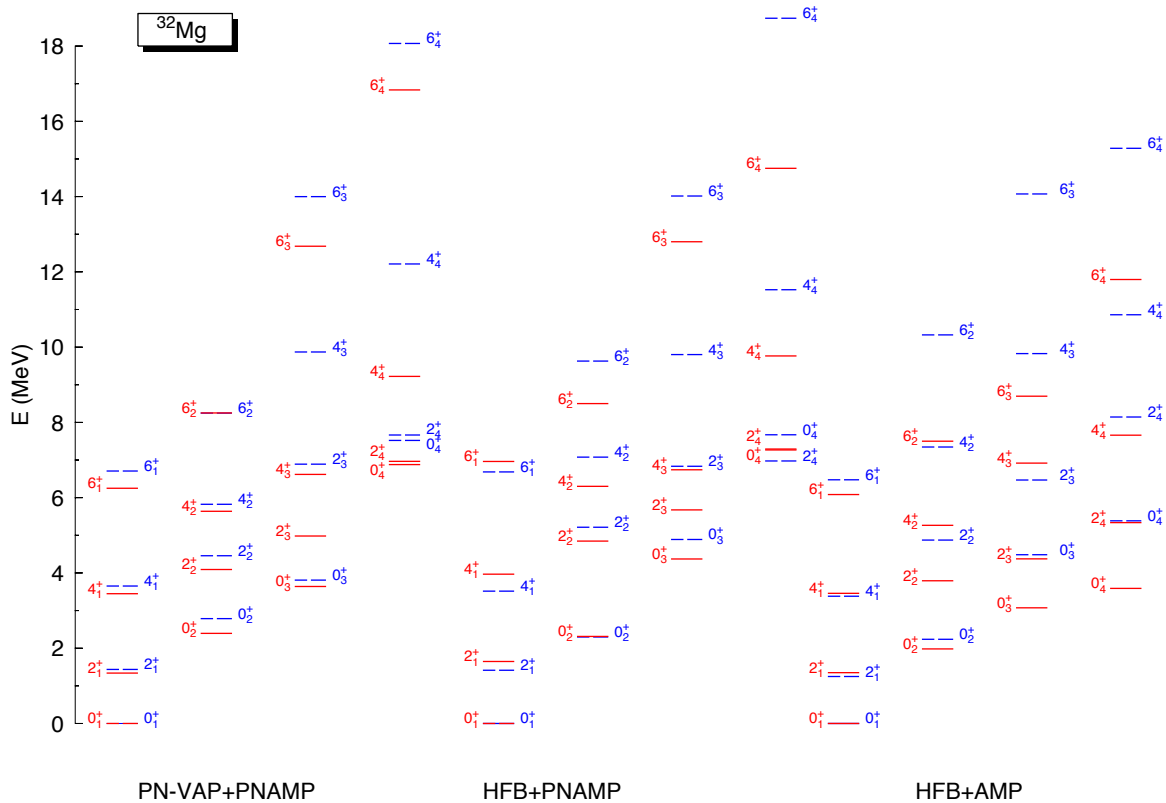
Por último, analizamos el espectro obtenido para el caso HFB+AMP (espectro de la derecha de la figura (6.6)). Es el que presenta una apariencia más comprimida de los tres casos estudiados, ya sea cuando se toma un grado de libertad o dos. Esto es debido, para este núcleo en esta aproximación, a que para los mínimos de la energía, tanto en una como en dos dimensiones, se obtienen menos correlaciones de apareamiento. Incluso van a hacerse cero para el caso unidimensional, panel (d) de la figura (6.2). Esto va asociado, como ya hemos dicho, a momentos de inercia mayores y espectros más comprimidos. Sin embargo, esta compresión del espectro ocurre también en núcleos con diferentes estructura, como era para el caso del Titanio (figura (4.7)) y se verá en la siguiente sección para los Magnesios (figuras 6.7 y 6.8), por lo que podemos afirmar que existe una explicación a este hecho relacionada con la ausencia de la proyección al número de partículas en esta aproximación, como ya se explicó en el análisis que se hacía en el capítulo 5 donde se es-



tudiaban aspectos relacionados con esta aproximación. Las soluciones de la ecuación de HW, en esta aproximación, van a tener mucha mezcla debido a contribuciones espurias cuyo origen es la no conservación del número de partículas.

### 6.4.2. Espectros para los Magnesios

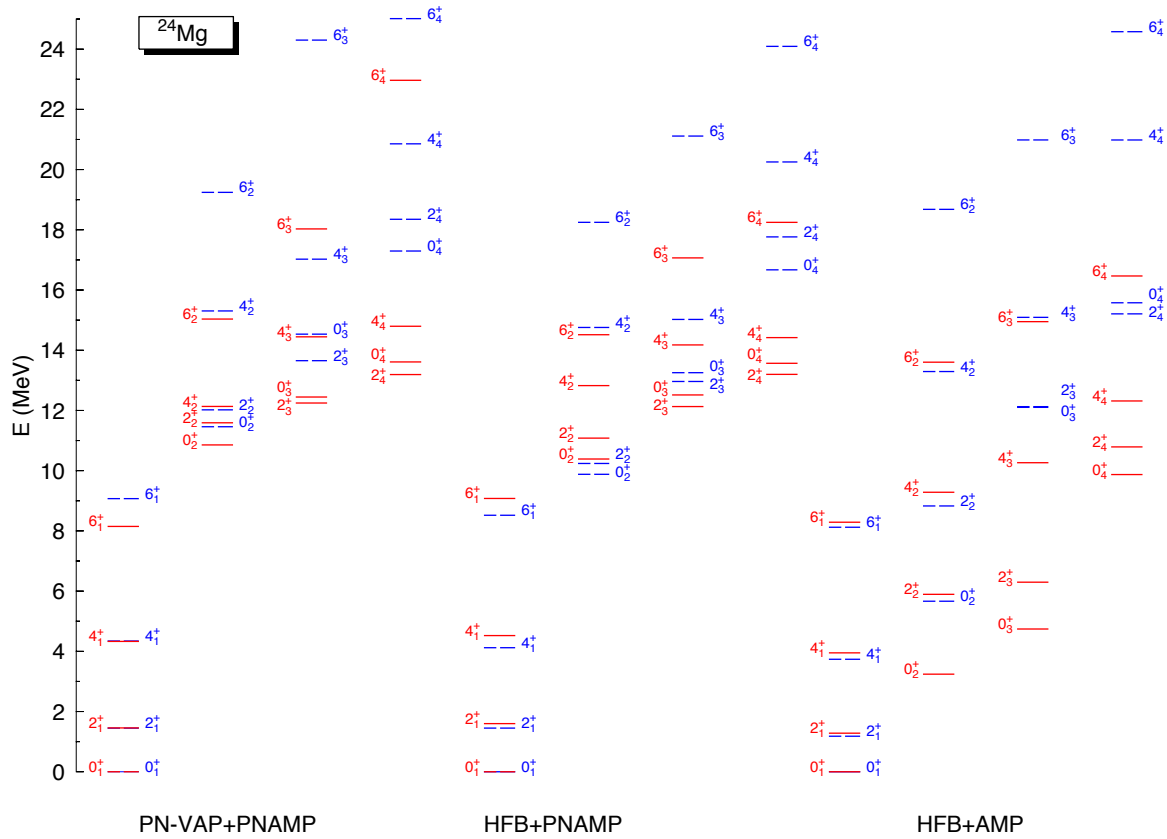
A continuación, pasamos a estudiar los espectros de dos isótopos del Magnesio. Estos núcleos son más ligeros que los dos primeros, siendo su número atómico 12, con 12 y 20 neutrones respectivamente. En lo que respecta al comportamiento de los espectros en función de la aproximación tomada, encontramos que es el mismo que ha sido discutido con detalle para los núcleos  $^{54}\text{Cr}$  y  $^{52}\text{Ti}$ , constatando así la validez de nuestras interpretaciones.



**Figura 6.7:** Espectros para el  $^{32}\text{Mg}$  en diferentes aproximaciones.

En la figura (6.7) se muestra el espectro del  $^{32}\text{Mg}$ . Podemos ver que globalmente el espectro PN-VAP+PNAMP se encuentra comprimido debido a que este núcleo presenta un carácter muy colectivo, como puede observarse en los potenciales de la figura 6.4, ya que si son comparados con el otro isótopo del mismo elemento, se observa que los primeros son mucho más anchos. Si comparamos este espectro con el de la aproximación HFB+AMP, vemos que pese a que existen marcadas diferencias, especialmente para los estados más excitados ( $\sigma = 3$  y  $4$ ), entre aquellos menos excitados con  $\sigma = 1$  y  $2$ , se encuentran diferencias menores que en el caso del Titanio o el Cromo. Este núcleo se ha demostrado experimentalmente que es deformado pese a ser mágico en neutrones, ya que tiene  $N=20$ . Los valores de sus energías de excitación  $E(2^+)$ ,  $E(2^+)/E(4^+)$  y su valor de la probabilidad de transición  $B(E2 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  indican la existencia de una banda rotacional para este núcleo [107] [108].

Los espectros del  $^{24}\text{Mg}$  se muestran en la figura (6.8). Este núcleo presentaba un potencial duro en ambas direcciones. En comparación con el caso anterior, encontramos grandes diferencias entre las aproximaciones. Para el caso HFB+AMP se observa, una vez más, una bajada de los niveles 2D que en esta aproximación es inusualmente grande. En este caso, las correlaciones de apareamiento para funciones de onda intrínsecas tipo HFB se van a cero en el mínimo del potencial, figura (6.3), lo que va a inducir un momento de inercia asociado grande. Además de este efecto, tendremos que añadir el efecto de la contribución espuria de la no conservación del número de partículas. En la descripción de los estados que conforman los espectros, estamos considerando dos grados de libertad colectivos; la deformación cuadrupolar y el gap de apareamiento. Es por este motivo, que los estados que sean colectivos van a estar muy bien descritos en nuestras aproximaciones. Sin embargo, los estados genuinos de partícula independiente, solo son descritos de forma aproximada. En este núcleo se puede observar que el estado excitado  $0_2^+$  está muy alto en energía comparado con el dato experimental que lo sitúa en 10.855 MeV, lo que nos indica que no está bien descrito por tratarse de un estado de dos cuasipartículas.



**Figura 6.8:** Espectros para el  $^{24}\text{Mg}$  en diferentes aproximaciones

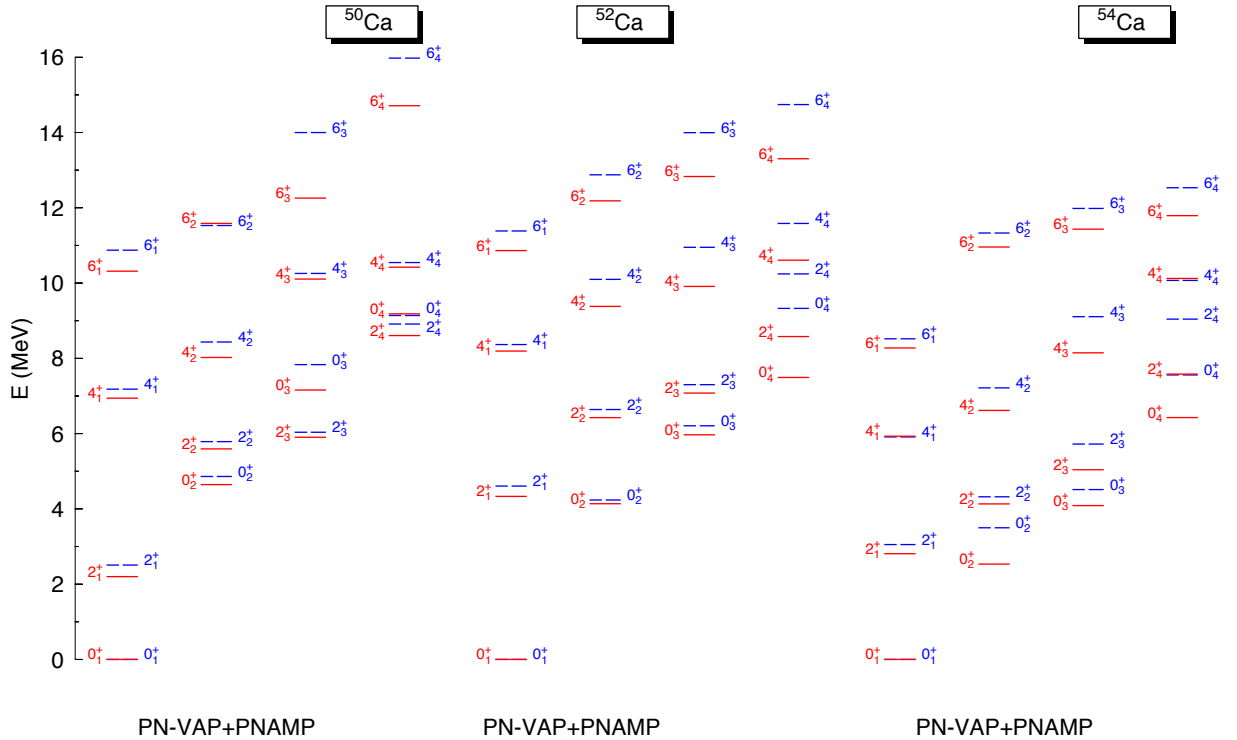
### 6.4.3. Espectros para los Calcio

Por cerrar esta sección dedicada a los espectros, se muestran en la figura (6.9) los espectros para los isótopos  $^{50-52-54}\text{Ca}$  solo en la aproximación PN-VAP+PNAMP, por ser la más completa. De esta forma, se puede ver como es la evolución de los espectros con el número de neutrones y, si tenemos en cuenta el  $^{54}\text{Cr}$  y el  $^{52}\text{Ti}$ , el mismo análisis puede aplicarse con respecto al número de protones. Observamos desplazamientos entre los niveles 2D y 1D siguiendo la misma tendencia que los núcleos discutidos más arriba en esta aproximación.

Según crece el número de neutrones, uno esperaría un aumento de la colectividad, sin embargo si miramos los espectros, vemos que esto no es cierto pues el  $^{52}\text{Ca}$  no parece una interpolación entre los otros dos núcleos vecinos. De

hecho, varios de los estados excitados de la primera y segunda banda están a una energía superior que los correspondientes al  $^{50}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$ , en particular, es interesante el estado  $2_1^+$ . Este hecho ha sido interpretado como un posible subcierre de capa en  $N = 32$ . Esta discusión se retomará en el capítulo 7. Destacar el hecho de que, sólo para en el  $^{50}\text{Ca}$ , se observa una inversión de los niveles  $2_3^+$  y  $2_4^+$  que se encuentran por debajo de de los  $0_3^+$  y  $0_4^+$  correspondientes.

Si comparamos este espectro con el obtenido para el  $^{52}\text{Ti}$  podemos ver el efecto de abrir la capa cerrada  $Z = 20$ . Los niveles para el Titanio, se encuentran visiblemente por debajo de los del  $^{50}\text{Ca}$ .



**Figura 6.9:** Espectros para los núcleos  $^{50}\text{Ca}$   $^{52}\text{Ca}$   $^{54}\text{Ca}$  en la aproximación PN-VAP+PNAMP

En esta sección se han analizado los espectros de varios núcleos de diferentes características por un doble motivo. Por un lado entender el papel que juegan las fluctuaciones de apareamiento en función de la estructura nuclear y la aproximación empleada. Por otro, mostrar como los efectos a gran esca-

la que se observan para el primer núcleo que hemos tomado de ejemplo, se repiten en todos ellos en un modo sistemático.

Como resumen podemos decir que es el método PN-VAP+PNAMP en dos dimensiones, el que ofrece la mejor aproximación a la solución real del sistema. No sólo por la inclusión de forma óptima de las correlaciones de apareamiento en ambas dimensiones sino porque, además, la ganancia que se obtiene en la energía para el espectro, debida el efecto de la inclusión de este grado extra de libertad, va en una dirección más acorde con lo obtenido experimentalmente.

Con respecto a las otras aproximaciones podemos decir que, los espectros HFB+AMP difieren mucho de los obtenidos con las otras dos aproximaciones. Para los de tipo HFB+PNAMP, tenemos el problema de la autoconsistencia, pero podemos decir que se parecen más a los de tipo PN-VAP+PNAMP, si bien sus estados están en general a energías superiores. Sin embargo, los espectros HFB+AMP y HFB+PNAMP tienen las mismas funciones de onda intrínsecas por lo que se puede deducir, que parte de esas divergencias obtenidas, tienen su origen en el número incorrecto de partículas.

## 6.5. Resumen

Como resumen a este descriptivo y extenso capítulo, en el que se han discutido las superficies de energía potencial y los espectros para varios núcleos como función de  $q$  y  $\delta$  recogemos, a modo de síntesis, las principales conclusiones que han sido extraídas:

- Podemos decir que, en general y de manera independiente a la aproximación elegida, las superficies de energía potencial muestran que los núcleos presentan una dependencia más suave con el grado de libertad del apareamiento. Si bien para un régimen donde el apareamiento es muy fuerte, la superficie de energía potencial se vuelve escarpada pues la energía crece rápidamente.
- Hemos visto que la autoconsistencia en los cálculos es un importante ingrediente. Los espectros de las aproximaciones PN-VAP+PNAMP y HFB+PNAMP mostraban diferencias atribuibles a este factor.
- Para la aproximación más completa, PN-VAP+PNAMP, la ganancia de energía que resulta al incluir la nueva coordenada, por ejemplo para el caso del  $^{54}\text{Cr}$  (tabla (6.1)), va desde 0.229 MeV para el estado  $0_1^+$ ; 0.666 MeV para el  $0_2^+$  hasta 1.549 MeV para el  $4_2^+$ .

- En los espectros hemos visto que por construcción los estados  $J = 0$  están favorecidos en una proyección tipo PAV del momento angular. Esto conlleva que los estados más excitados, ya sean del mismo o diferente  $J$ , presenten mayores bajadas en la energía. Para el caso en el que se tenga una proyección al momento angular, sería interesante poder implementar una proyección tipo VAP (tema que está fuera del propósito de esta memoria) para obtener el momento de inercia adecuado.
- Si no se tiene en cuenta la proyección al número de partículas, las correlaciones de apareamiento no van a ser incluidas de manera adecuada. Es necesario, al menos, como hemos visto para las superficies de energía, una corrección con multiplicadores de Lagrange.
- Los espectros obtenidos sin proyección al número de partículas tienen los estados mucho más juntos, mostrando una apariencia de espectros muy comprimidos hasta llegar a hacerlos poco realistas. Se han dado argumentos que justifican esta situación.
- Los espectros enfatizan por un lado, la relevancia de la proyección al número de partículas y por otro, el impacto que tienen sobre ellos las correlaciones de apareamiento.
- Para obtener mejores descripciones de los espectros, se debería permitir la ruptura de la simetría de inversión temporal e incluir excitaciones de cuasipartícula, tomando como punto de partida la aproximación PN-VAP+PNAMP 2D.

# Capítulo 7

## Resultados de observables nucleares como función de $q$ y $\delta$

Tras haber explicado el método que se ha seguido para el estudio de las fluctuaciones de apareamiento en el capítulo 4, haber discutido las diferencias que se dan entre las distintas aproximaciones en los capítulos 5 y 6, y haber extendido el análisis de las superficies de energía potencial y los espectros a diferentes núcleos en el capítulo 6, pasamos a examinar otras magnitudes nucleares relevantes. En particular; las energías de separación (sección 7.1), las probabilidades de transición reducidas  $B(E2)$  (sección 7.2), las energías de excitación  $2^+$  para los isótopos del Calcio  $^{50-54}\text{Ca}$  (sección 7.3) y las transiciones transiciones eléctricas monopolares  $\rho^2(E0)$  (sección 7.4). Además, se comparan los valores teóricos con los correspondientes datos experimentales.

Todos los cálculos de esta sección se obtienen con la aproximación PN-VAP+PNAMP y la interacción de Gogny D1S, ya que se ha concluido en los análisis anteriores que es la más completa.

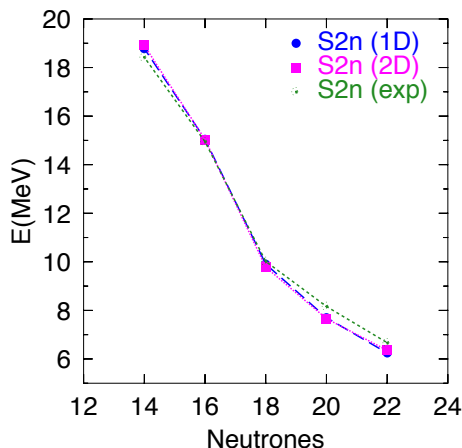
### 7.1. Energías de separación

Las energías de separación de protones/neutrones sirven para determinar posibles cierres de capa, apareciendo saltos bruscos en los números mágicos. Además, determinan los límites de la existencia de los núcleos como sistemas ligados (líneas de goteo) y juegan un papel clave en la astrofísica nuclear [109]. Dado que, por el momento, no se pueden calcular núcleos impares con este grado de sofisticación de la teoría, nos centramos en las energías de separación de dos partículas.

Empezamos con las energías de separación de dos neutrones. Se definen como

la diferencia entre las energías de ligadura de los isótopos con  $N$  y  $N - 2$  protones.

$$S_{2n}(N) = BE(Z, N) - BE(Z, N - 2) \quad (7.1)$$



**Figura 7.1:** Energías de separación de dos neutrones en MeV para la cadena isotópica del Mg.

En la figura (7.1) se representan las energías de separación de dos neutrones. Observamos que según aumenta el número de neutrones la energía disminuye, como es lógico, si nos alejamos de la estabilidad. Para  $N = 16$  se produce una bajada abrupta de la energía que se corresponde con el subcierre de la capa  $s_{1/2}$ . Sin embargo, para el cierre  $N = 20$  no se observa una gran bajada en la energía, como cabría esperar por ser un cierre de capa, ya que el núcleo con ese número de neutrones, el  $^{32}\text{Mg}$ , es un caso especial, que volverá a centrar nuestra atención en la sección 7.4. La conformidad entre los datos experimentales y los valores teóricos es excelente ya que no se aprecian diferencias significativas cuantitativas entre ellos.

De modo análogo, se puede definir la energía de separación de dos protones, como la diferencia entre las energías de ligadura de dos isótonos.

$$S_{2p}(Z) = BE(Z, N) - BE(Z - 2, N) \quad (7.2)$$

En este caso, damos los datos para la cadena  $N=30$  formada por los núcleos  $^{50}\text{Ca}$ ,  $^{52}\text{Ti}$  y  $^{54}\text{Cr}$ , tabla (7.1).



$S_{2p}$	1D	2D	Exp
$^{52}\text{Ti}$	25.349	25.314	24.472
$^{54}\text{Cr}$	22.483	22.408	22.046

**Tabla 7.1:** Energías de separación entre dos protones ( $S_{2p}$ ) calculadas para la cadena  $N = 30$  y expresadas en MeV. Se muestra por columnas los resultados de un cálculo unidimensional, otro bidimensional y los datos experimentales respectivamente.

Las energías de separación, por definición, solo implican las propiedades del estado fundamental. Por este motivo, las diferencias que se observan entre los casos 1D y 2D son muy pequeñas, a la vez que se aprecia un notable acuerdo con los datos experimentales (figura 7.1 y tabla 7.1). Dichos valores para ambas energías de separación están tomados de [110].

## 7.2. Probabilidades de transición cuadrupolares

Una medida complementaria a las energías de excitación para determinar la colectividad de los estados nucleares, son las probabilidades de transición reducidas  $B(E2)$ . En esta sección estudiamos las probabilidades de transición cuadrupolares eléctricas reducidas,  $E2$ , entre estados  $0_1^+ \rightarrow 2_1^+$  usando funciones de onda calculadas con el método del generador de coordenadas y proyectados simultáneamente a buen  $N$  y  $J$ . En general, la probabilidad de una transición eléctrica reducida viene dada por la expresión:

$$B(E\lambda, J_2\sigma_2 \rightarrow J_1\sigma_1) = \frac{1}{2J_2 + 1} |\langle \Phi^{NZJ_1\sigma_1} | \hat{M}_\lambda^{elec} | \Phi^{NZJ_2\sigma_2} \rangle|^2, \quad (7.3)$$

siendo:

$$\hat{M}_\lambda^{elec} = r^\lambda Y_{2\mu}(\theta, \phi) \quad (7.4)$$

el operador de transición que actúa sobre los protones. Para transiciones  $E2$ , se toma  $\lambda = 2$ . Además,  $Y_{2\mu}(\theta, \phi)$  son los armónicos esféricos.

El elemento de matriz reducido  $\langle \Phi^{NZJ_1\sigma_1} | \hat{M}_2^{elec} | \Phi^{NZJ_2\sigma_2} \rangle$  se calcula con los estados del generador (3.139) [58, 65, 78, 111].

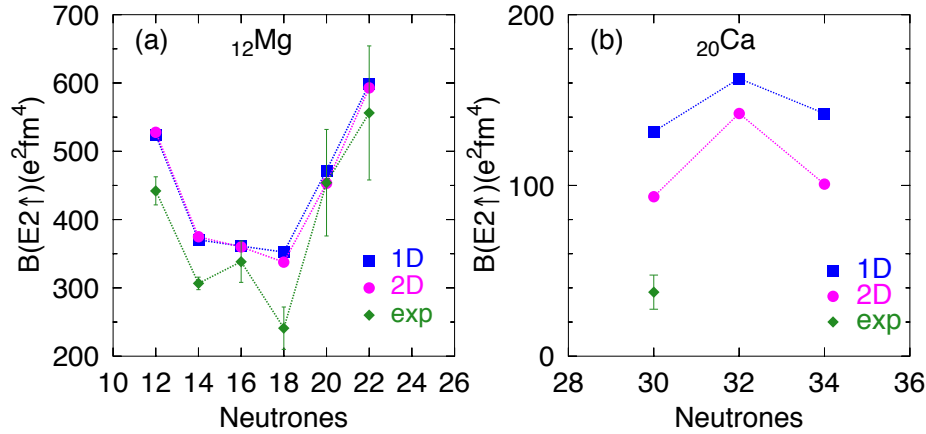
Debido a que se usan bases de partícula independiente grandes, sin *core*, las cargas efectivas de protones y neutrones son sus respectivas cargas desnudas:  $q_\pi = 1$  y  $q_\nu = 0$  [14, 112].

En la figura (7.2) se pueden ver las probabilidades de transición cuadrupolares eléctricas reducidas:  $B(E2, 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ , para las cadenas isotópicas formadas por isótopos del Magnesio (izquierda) y del Calcio (derecha) que ya han sido utilizadas anteriormente.

En el primer caso, se observa que los resultados teóricos siguen, más o menos, el comportamiento de forma experimental. Sin embargo, el comportamiento en zigzag no es tan acusado como en el caso experimental ya que en el valor teórico para el  $^{30}\text{Mg}$  está ligeramente sobreestimado. Se observa que los núcleos:  $^{24}\text{Mg}$ ,  $^{32}\text{Mg}$  y  $^{34}\text{Mg}$ , tienen los valores de las  $B(E2)$  más altos, indicando que dichos núcleos son más colectivos. Particularmente interesante es el caso del  $^{32}\text{Mg}$  ya que tiene  $N = 20$  y se esperaría que el valor de  $B(E2)$  en este caso fuese pequeño, sin embargo es superior al que se obtiene para el  $^{30}\text{Mg}$ .

Podemos decir que en general, las predicciones teóricas para la cadena del Magnesio reproducen cualitativamente bien el comportamiento que muestran los datos experimentales aunque los valores teóricos son más elevados. Cuando se incluyen las fluctuaciones de apareamiento, se observa que el efecto que producen, es disminuir los valores de las predicciones teóricas y acercarlos a los datos experimentales.

Para los isótopos del Calcio, las fluctuaciones de apareamiento, tienen un efecto mayor, llegando a reducir su valor en un 30 % con respecto a los valores de 1D. En este caso faltan datos experimentales para poder ofrecer conclusiones.



**Figura 7.2:** Probabilidades de transición  $B(E2, 0_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  para Magnesios y Calcio. Los datos experimentales están tomados de [110] [113], [108], [114] y [115]

Para otros núcleos estudiados, se muestran las probabilidades de transi-

ción en la tabla (7.2). Comparando estos valores podemos comprobar que los núcleos más deformados, por ejemplo  $^{54}\text{Cr}$  frente al  $^{50}\text{Ca}$  o  $^{52}\text{Ti}$  presentan transiciones de valores más altos. A medida que aumenta el número de protones fuera del cierre de capa ( $Z=20$ ,  $Z=22$  y  $Z=24$  respectivamente para los tres núcleos mencionados) los efectos colectivos tendrán mayor peso.

Por otro lado, observamos de nuevo que los valores teóricos obtenidos a partir de estados que dependen de la fluctuación del número de partículas y del momento cuadrupolar son menores (para todas las transiciones calculadas) que los que se obtienen en el caso de depender sólo del segundo.

B(E2 $\uparrow$ )	$^{54}\text{Cr}$ 1D	$^{54}\text{Cr}$ 2D	$^{54}\text{Cr}$ exp	$^{52}\text{Ti}$ 1D	$^{52}\text{Ti}$ 2D	$^{52}\text{Ti}$ 2D
$0_1^+ \rightarrow 2_1^+$	1256.233	1244.361	885.05 (36)	643.252	601.238	567 (51)

**Tabla 7.2:** Diferentes probabilidades de transición, B(E2 $\uparrow$ ), calculadas en una y dos dimensiones expresadas en  $e^2\text{fm}^4$  y comparadas con los datos experimentales [110, 113, 116].

Podemos concluir que la tendencia que se observa cuando se incluye  $\delta$  consiste en disminuir las  $B(E2)$  con respecto a los casos 1D y, en los casos estudiados, obtener un mejor acuerdo con el experimento, si bien los valores teóricos para ciertos núcleos siguen siendo bastante elevados, mostrando las limitaciones del presente marco teórico.

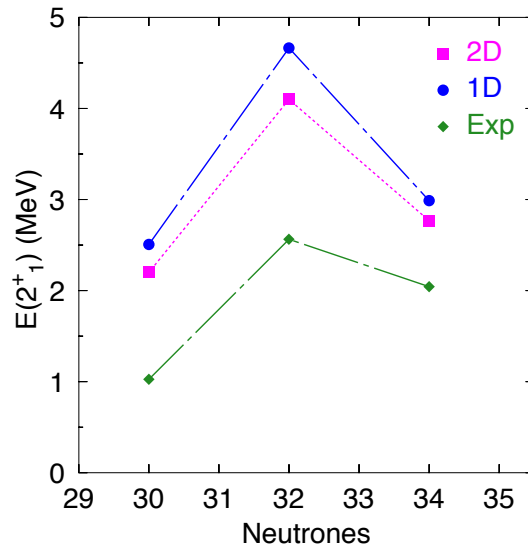
### 7.3. Energías de excitación $2^+$ para la cadena isotópica del Calcio

El Modelo de Capas, tomando un potencial de oscilador armónico más un término de espín órbita, predice la existencia de los ya bien conocidos números mágicos [35, 117] (cierres de capa de dicho potencial): 2, 8, 20, 28, 50, 82 y 126. Estos números se corresponden con el número de protones o neutrones que tiene ciertos núcleos y que presentan unas ciertas propiedades notorias, como mayor estabilidad, saltos en las energías de separación, diferencias entre las energías de ligadura con respecto a lo que se obtenía para el modelo de la gota líquida, esfericidad, etc.

El desarrollo experimentado tanto por la física nuclear teórica como experimental ha permitido explorar nuevas regiones de la tabla de núcleos, poniendo nuevas cuestiones sobre la mesa como la discusión de la degradación o aparición de nuevos cierres de capa fuera del valle de la estabilidad. Hemos recuperado aquí el análisis para los posibles cierres en  $N=32$  y  $N=34$  tomando

la cadena isotópica del Calcio que ha sido ampliamente discutida [14,118,119] introduciendo el nuevo grado de libertad.

Los observables relevantes para determinar un posible cierre de capa van a ser, por las propiedades citadas más arriba, la energía del primer estado excitado  $2^+$  (presentaría un valor alto); la probabilidad de transición entre ese estado y el fundamental (por correlación con la energía de excitación serán valores pequeños) y las energías de separación correspondientes presentarían un salto abrupto.



**Figura 7.3:** energías de excitación para los primeros estados  $2_1^+$  de los isótopos del Calcio:  $^{50}\text{Ca}$ ,  $^{52}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$ . Los símbolos azul y magenta (círculos y cuadrados respectivamente) se corresponden con las energías de excitación calculadas con el generador de coordenadas en una y dos dimensiones respectivamente, mientras que los diamantes verdes muestran los datos experimentales.

Mostramos la energía de excitación del estado  $2_1^+$  para la cadena isotópica  $^{50}\text{Ca}$ ,  $^{52}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$ , figura (7.3), dentro del marco de la coordenada generadora con funciones de onda PN-VAP proyectadas a buen momento angular y a buen número de partículas. En azul y magenta están representados los valores teóricos para cálculos 1D y 2D respectivamente y en verde los datos experimentales.

Como ya hemos visto en los espectros, si comparamos los datos de 1D y 2D obtenemos valores más bajos de la energía de excitación para el segundo caso. Por otro lado, las predicciones teóricas en 2D muestran el mismo comportamiento cualitativo que los datos experimentales para los puntos dados por el  $^{50}\text{Ca}$  y el  $^{52}\text{Ca}$  y  $^{54}\text{Ca}$ . Sin embargo, cuantitativamente las predicciones

teóricas dan valores más elevados. Para obtener mejores resultados, en este caso en el que los Calcios tienen un cierre en  $Z = 20$ , sería interesante poder incluir en la descripción teórica excitaciones de cuasipartícula.

Observamos que el estado  $2_1^+$  del núcleo  $^{52}\text{Ca}$  está claramente más alto en energía que sus vecinos, por lo que  $N=32$  puede ser interpretado como un buen subcierre de capa [14].

Menos claro es el caso del  $^{54}\text{Ca}$ ; la energía de su estado  $2_1^+$  correspondiente, no es tan alta como la del mismo estado para el núcleo  $^{52}\text{Ca}$  pero tampoco baja, como se esperaría, hasta el nivel (o incluso más abajo) al que se encuentra el del núcleo  $^{50}\text{Ca}$ . Recientemente se ha medido la energía de excitación para el  $^{54}\text{Ca}$  [120]. Nuestras predicciones se muestran de acuerdo con este resultado experimental.

Concluimos, a la vista de la gráfica, que nuestros resultados con un generador bidimensional se muestran de acuerdo con un posible subcierre de capa en  $N=32$  y  $N=34$ .

## 7.4. Transiciones eléctricas monopulares.

Estudiamos ahora las probabilidades de transición eléctricas monopulares. En estas transiciones se cumple que  $\Delta J = 0$  y no hay cambio en la paridad. En nuestro caso, vamos a estudiarlas entre estados  $0_2^+ \rightarrow 0_1^+$ . Como las correlaciones de apareamiento juegan un papel destacado en la descripción de los estados  $0_2^+$  esperamos que para esta cantidad se encuentren diferencias remarcables entre los casos 1D y 2D. El observable asociado a una transición eléctrica monopolar es  $\rho^2(E0)$ , ecuación (7.6), y es relevante para estudiar la coexistencia de forma cuando las energías de excitación de los estados  $0_2^+$  sean relativamente pequeñas o sean los primeros estados excitados del núcleo. Se define el operador eléctrico monopolar a un cuerpo E0 como [121]:

$$\hat{T}(E0) = \sum_k e_k \hat{r}_k^2 \quad (7.5)$$

Los elementos de matriz diagonales del solape de este operador definen el radio de carga mientras que los no diagonales van a estar asociados a las transiciones.

La probabilidad de transición monopolar se define como:

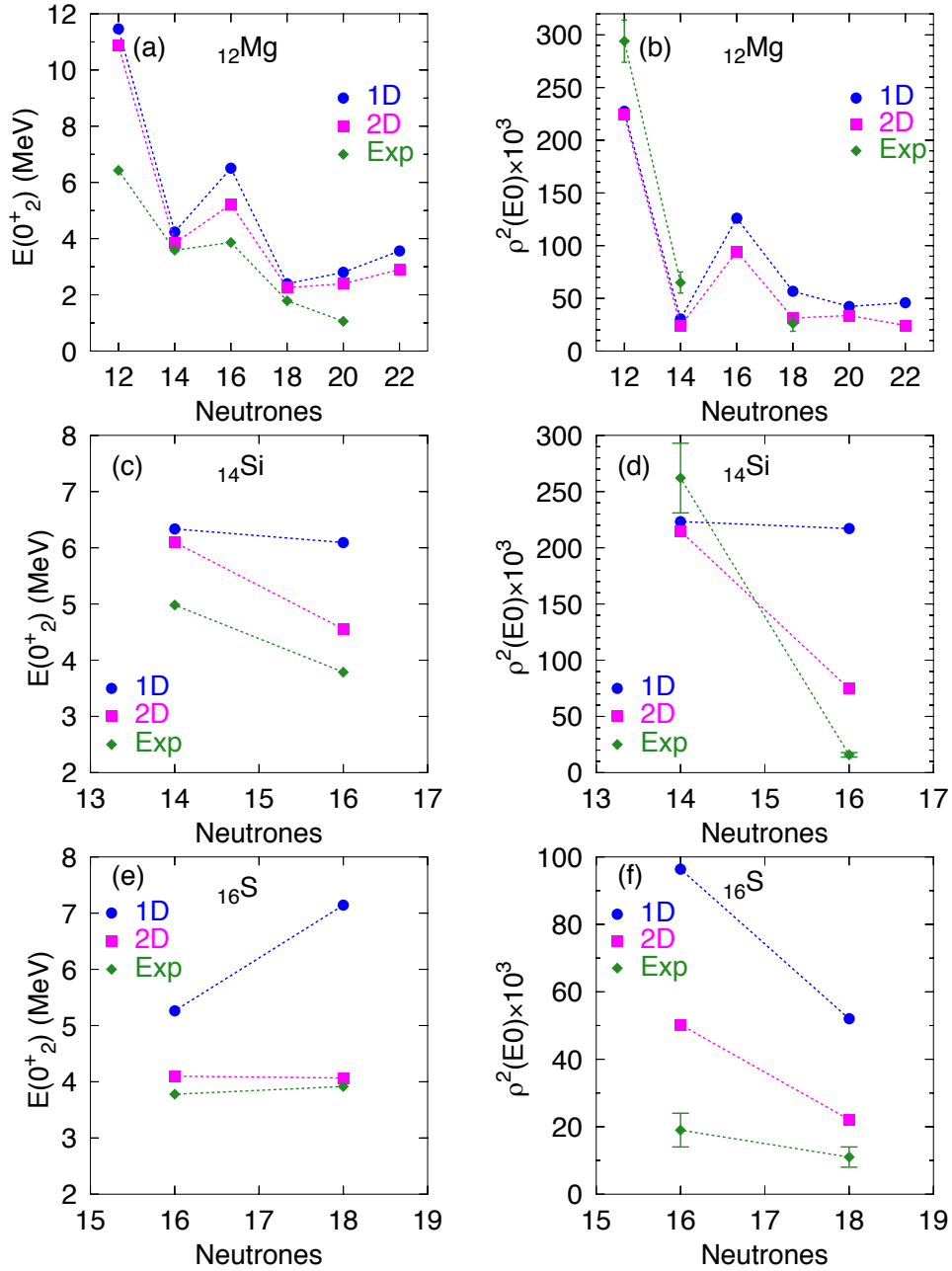
$$\rho^2(E0) = \frac{1}{R^4} \left| \langle \Phi_f | \sum_k e_k r_k^2 | \Phi_i \rangle \right|^2, \quad (7.6)$$

siendo  $R = 1.2A^{1/3}$  y  $\Phi_i, \Phi_f$  las funciones de onda de los estados iniciales y final respectivamente, en este caso, la de los estados  $0_2^+$  and  $0_1^+$ .

Si los núcleos poseen estados con distintos mínimos en las PES para diferentes deformaciones, entonces uno observa diferencias en el radio cuadrático medio de carga. Por otro lado, debido a que la forma y el radio del núcleo están íntimamente relacionados, las correspondientes transiciones  $E0$  van a estar relacionadas con la forma que tienen los estados inicial y final implicados [122, 123]. Si un núcleo posee configuraciones con diferentes deformaciones y se mezclan, se observarán transiciones eléctricas monopolares mayores. Por ejemplo, la transición  $E0(0_2^+ \rightarrow 0_1^+)$  permite diferenciar situaciones en las que dos configuraciones compiten por ser el estado fundamental o el primer excitado como es el caso de la isla de inversión para el  $^{32}\text{Mg}$ . En el marco del modelo de capas, dos neutrones son excitados desde la capa  $d_{3/2}$  al orbital intruso  $f_{7/2}$  dando lugar a una configuración deformada que compite con la configuración esférica pudiendo incluso el estado intruso convertirse en el fundamental [115, 124]. En esta situación de competición entre configuraciones y en ausencia de mezcla, uno esperaría un estado deformado  $0_1^+$  y otro cerca del esférico  $0_2^+$  o a la inversa.

En la figura (7.4), gráficas superiores, se muestran las energías de excitación y los valores de  $E0(0_2^+ \rightarrow 0_1^+)$  para los isótopos del Magnesio. Si miramos la energía de excitación del estado  $0_2^+$ , gráfica superior izquierda (a), observamos que la diferencia entre los cálculos de 1D y 2D es de aproximadamente de 1MeV y que ambos siguen la tendencia de los datos experimentales, si bien los datos del caso bidimensional están ligeramente en mayor acuerdo que los de una dimensión. El valor para el  $^{24}\text{Mg}$  presenta una notable diferencia entre las predicciones teóricas y los datos experimentales, probablemente porque éste es un estado de dos cuasipartículas que no podemos describir adecuadamente.

En la gráfica superior derecha (b) se representan los valores de  $\rho^2(E0, 0_2^+ \rightarrow 0_1^+)$  para la cadena  $^{24-34}\text{Mg}$ . De nuevo, no encontramos diferencias cualitativas entre los tres datos expuestos pues todos presentan el mismo comportamiento, aunque las predicciones del caso 2D presenta valores inferiores que pueden llegar a ser significativos como el caso del  $^{30}\text{Mg}$ , para el cual el cálculo 2D reduce el valor que se obtiene para el caso 1D en un factor dos, reproduciendo de este modo el valor experimental.



**Figura 7.4:** Energías de excitación para los estados  $0_2^+$  y  $\rho^2(E0, 0_2^+ \rightarrow 0_1^+)$  para los isótopos del Magnesio (gráficas de arriba), los isótopos de Silicio (en el medio) y isótopos del azufre (gráficas de abajo). Los datos experimentales han sido tomados de las referencias: [125], [110], [122], [115].

$\langle r^2 \rangle_{\text{ch}}^{1/2}$ (fm)	1D	2D	Exp
$^{24}\text{Mg}$	3.095	3.098	3.057
$^{26}\text{Mg}$	3.065	3.068	3.034
$^{28}\text{Mg}$	3.078	3.082	3.070
$^{30}\text{Mg}$	3.106	3.110	3.111
$^{32}\text{Mg}$	3.158	3.159	3.186
$^{34}\text{Mg}$	3.210	3.213	

**Tabla 7.3:** Radio nuclear de carga para el estado fundamental de los isótopos del Magnesio, los datos experimentales han sido tomados de [126]

En la tabla (7.3) se dan los valores para el radio de carga en los isótopos del Magnesio, para los dos tipos de cálculo y se compara con el experimento. Ambos cálculos difieren ligeramente y muestran buen acuerdo con los datos experimentales.

En los paneles del medio de la figura (7.4) se representan las energías de excitación de los estados  $0_2^+$  (c) y las probabilidades de transición monopolaes (d) para los isótopos  $^{28}\text{Si}$  y  $^{30}\text{Si}$  del Silicio.

En este caso observamos apreciables diferencias tanto cualitativas como cuantitativas entre ambos casos. Las predicciones en 1D no ofrecen, para ninguna de las dos magnitudes, ni el comportamiento ni el valor correcto, mientras que el caso 2D mejora de forma considerable el acuerdo con los datos experimentales. En concreto, para el caso  $^{30}\text{Si}$ , encontramos una reducción en la energía de excitación de 1.5 MeV con respecto al otro cálculo que hace que baje hasta reproducir la tendencia experimental. Para el  $\rho$ , el valor 2D es un factor 3 más pequeño que para el caso 1D, hasta situarlo de nuevo en acuerdo con el comportamiento experimental.

Estos cambios tan grandes que observamos al incluir las fluctuaciones de apareamiento, es probable que estén relacionados con el subcierre de la capa  $2s_{1/2}$  que se tiene para  $N = 16$ . El hecho de permitir en dicha configuración al sistema que explore el grado de libertad del apareamiento trae importantes correlaciones que son las que van a originar estas bajadas que observamos en los valores 2D.

Por último, en la zona inferior de la figura (7.4) se muestran los mismos resultados para la energía y las transiciones monopolaes, paneles (e) y (f) respectivamente, ahora para los isótopos del Azufre.

Las conclusiones que pueden sacarse en este caso son análogas al caso de los isótopos del Silicio. La aproximación con 1D no reproduce en modo alguno



la energía de los estados  $0_2^+$  pues va incluso en sentido contrario al comportamiento experimental para el caso  $^{32}\text{S}$ . El considerar las fluctuaciones de apareamiento reduce en 3 MeV el valor de la energía hasta situarlo en línea con el dato experimental. Lo mismo se puede decir para la intensidad la transición monopolar donde una aproximación en 2D reduce el valor unidimensional en un factor 2 de modo que los datos experimentales están en este caso mejor reproducidos.

A partir de los resultados mostrados en este capítulo, podemos concluir que:

- Se obtienen buenas predicciones teóricas para los observables calculados: energías de ligadura, transiciones, etc, que reproducen el comportamiento cualitativo experimental, obteniendo un mayor grado de acuerdo cuando se incorpora la coordenada  $\delta$ .
- Los valores teóricos para ciertos núcleos siguen siendo bastante elevados, lo que nos indica que es necesario hacer mejoras en el método para poder reproducir el comportamiento cuantitativo. Se espera que se obtenga un mayor grado de precisión si:
  - a) Se hace una proyección VAP al momento angular.
  - b) Se incluyen grados de libertad extra, por ejemplo, mediante la ruptura de más simetrías, como la de inversión temporal.
  - c) Se pueden considerar excitaciones de quasipartículas.
  - d) Se extienden los cálculos al caso triaxial.
- Se dan los resultados de las energías de excitación de los estados  $2^+$  para los Calcio. Tras analizar su comportamiento se puede interpretar  $N=32$  como un buen subcierre de capa mientras que para  $N=34$  no es tan robusto.



# Capítulo 8

## Vibraciones colectivas

Cuando en un núcleo se tienen excitaciones colectivas, esto es, excitaciones que involucran varios nucleones, generalmente, se va a dar lugar al movimiento coherente de varios nucleones dentro del núcleo que se manifiestan como un movimiento macroscópico del mismo. El estudio de los movimientos colectivos nucleares es interesante ya que constituyen otra aproximación para estudiar las interacciones a  $n$ -cuerpos y la fuerza nuclear. Estas excitaciones colectivas pueden ser de diferente tipo. En este trabajo, estamos interesados en las vibraciones cuadrupolares y de apareamiento. Para las primeras, se dio una breve descripción en la sección 2.4. El concepto de vibración de apareamiento es análogo al de las vibraciones espaciales, pero para la coordenada  $\delta$ , en lugar de en la deformación,  $q$ .

Dedicamos la primera parte de este capítulo al estudio de estas vibraciones colectivas cuadrupolares y de apareamiento, sección 8.2. Es particularmente interesante el caso de las segundas, ya que han sido objeto de estudio [88] y son las que se encuentran asociadas a la nueva coordenada que se ha incorporado en este trabajo. Se investigará, si es posible, interpretar alguno de los estados con momento angular  $J = 0$  como una vibración genuina de apareamiento. La cuestión principal que se plantea, es si existen de forma genuina o si están de alguna forma desdibujadas o amortiguadas por el grado de libertad cuadrupolar.

Con el objetivo de encontrar las vibraciones asociadas a la forma y al apareamiento de forma separada, es interesante saber el papel que juega cada una de las coordenadas. Para ello, podemos desacoplar de algún modo ambos grados de libertad. Lo que se propone es lo siguiente; hacer dos series de cálculos unidimensionales. En uno no se considera la interacción entre las diferentes formas nucleares y en el otro, la interacción entre funciones de onda con diferente apareamiento. Se estudian las funciones de onda en aproxima-

ción PN-VAP+PNAMP del  $^{52}\text{Ti}$  con acoplamiento en  $q$ , esto es, cuando se toma ésta como coordenada generadora y  $\delta$  fijo para estudiar las vibraciones cuadrupolares, subsección 8.2.1, así como el caso contrario, funciones de onda con acoplamiento en  $\delta$  y  $q$  fijo para estudiar las vibraciones de apareamiento, subsección 8.2.2.

En la otra mitad de este capítulo se discuten las funciones de onda colectivas para estados  $0^+$  del mismo núcleo, como función de la deformación y de las fluctuaciones de apareamiento. Es decir, ya con un cálculo completo en el que se considera el acoplamiento en  $\delta$  y  $q$ . Las funciones de onda calculadas dentro de la aproximación PN-VAP+PNAMP se muestran en la sección 8.3 donde, además, se comparan con las funciones de onda obtenidas en las subsecciones anteriores, 8.2.1 y 8.2.2.

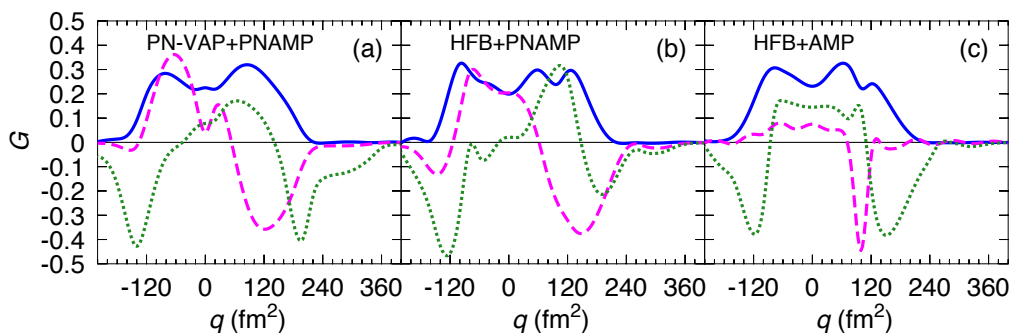
Las mismas funciones de onda pero dentro de las otras dos aproximaciones que estamos contemplando, se tratan en la sección 8.4. Es de esperar que se encuentren diferencias apreciables según tomemos una aproximación u otra. Nos van a ofrecer una interpretación física de los estados que representan, lo que va a resultar de utilidad para entender efectos tales como la dependencia lineal y la mezcla de estados, que se observan en la aproximación HFB+AMP. Las funciones de onda 1D del Titanio también se discuten en la sección 8.1 como aproximación al estudio de las vibraciones cuadrupolares a partir del caso autoconsistente, siendo el punto de partida de este capítulo.

## 8.1. Vibraciones cuadrupolares. Caso autoconsistente

Para estudiar la posible aparición de modos de vibración en el espectro nuclear, vamos a estudiar la estructura nodal de las funciones de onda colectivas correspondientes al estado fundamental y los dos primeros estados excitados  $0^+$ . La función de onda colectiva viene dada por la expresión de  $G(q, \delta)$  definida en (3.141), que se obtiene como resultado de resolver la ecuación HW. Es usual tomar esta magnitud al cuadrado, sin embargo, si no se toma el cuadrado, las funciones de onda van a cambiar de signo cortando el eje de abscisas, y esta representación va a ser de utilidad a la hora de describir las vibraciones de forma o de apareamiento. El signo arbitrario de la función de onda se escoge de manera que el estado fundamental sea positivo. Tomamos como ejemplo el caso del  $^{52}\text{Ti}$ . Empezamos primero mostrando el caso unidimensional, figura (8.1).

En la figura (8.1), panel (a), representamos los estados calculados en la apro-

ximación PN-VAP+PNAMP. La función de onda del estado fundamental está comprendida en un intervalo  $q \in [-160, 220] \text{ fm}^2$  y presenta un máximo oblate en  $q = -100 \text{ fm}^2$  y otro prolate ligeramente más alto en  $q = 100 \text{ fm}^2$ . Estos puntos se corresponden con los mínimos en la PES, panel (c) de la figura (6.1). El estado excitado  $0_2^+$  está definido también en el mismo intervalo de deformación y tiene una estructura parecida a la del estado fundamental, pero con el signo invertido en la parte prolate y una pequeña oscilación alrededor del punto esférico. Este tipo de estado, en el que se corta una vez la línea  $G = 0$ , es característico de una vibración tipo beta asociada a la deformación. El estado  $0_3^+$  presenta una estructura de dos nodos, esto es, corta dos veces al eje X, y los máximos, en valor absoluto, se localizan, en este caso, para valores mayores de  $q$  tanto en la parte prolate como en la oblate.



**Figura 8.1:** Funciones de onda colectivas para el  $^{52}\text{Ti}$  con momento angular  $J = 0$  como función de la deformación cuadrupolar  $q$ , en diferentes aproximaciones. La línea azul continua representa el estado  $0_1^+$ , la línea de trazos magenta el estado  $0_2^+$  y línea verde de puntos el  $0_3^+$ . La función de onda del estado  $0_2^+$  en la aproximación HFB+AMP ha sido multiplicada por un factor de escala igual a 0.5 para poder representar los tres estados en la misma escala y que se puedan visualizar correctamente. La línea  $G = 0$  está marcada para diferenciar la zona positiva del eje Y de la negativa.

En el panel del medio de la figura están las funciones de onda correspondientes al caso HFB+PNAMP. La función de onda del estado  $0_1^+$  tiene el máximo prolate roto en dos, debido al colapso de la energía de apareamiento de HFB para los neutrones que se da justo para esa deformación,  $100 \text{ fm}^2$ , panel (d) de la figura (6.1).

La función de onda para el estado  $0_2^+$  presenta una estructura de un nodo con un máximo y un mínimo, siendo muy similar a la correspondiente para el mismo estado en la aproximación anterior.

La función colectiva del estado  $0_3^+$ , si bien es similar a la del caso PN-VAP+PNAMP, muestra un comportamiento más irregular alrededor de la

forma esférica y el mínimo oblate se encuentra por debajo del prolata en este caso.

En la parte derecha de la figura están las funciones de onda correspondientes al caso HFB+AMP. Su potencial, que se puede ver en el panel (c) de la figura (6.1), presentaba la misma estructura de dos mínimos que los anteriores por lo que es de esperar que las funciones de onda tengan una distribución parecida.

El estado fundamental  $0_1^+$ , al igual que en el caso HFB+PNAMP, presenta la separación en dos máximos del máximo prolata con respecto al caso visto en la aproximación PN-VAP+PNAMP. Por lo demás, es bastante similar a los dos casos previamente estudiados.

El primer estado excitado  $0_2^+$  es el que es más diferente, con respecto a sus homónimos, de los que hemos visto hasta ahora. Presenta un mínimo muy intenso (nótese que además está multiplicado por un factor 0.5 para que se ajuste a la escala utilizada) para la deformación donde la energía de apareamiento de neutrones se anula.

El segundo estado excitado,  $0_3^+$ , presenta un primer máximo prolata muy plano alrededor del esférico y dos mínimos de intensidad parecida, uno oblate y otro prolata, a deformaciones similares a las encontrados en los dos casos anteriores.

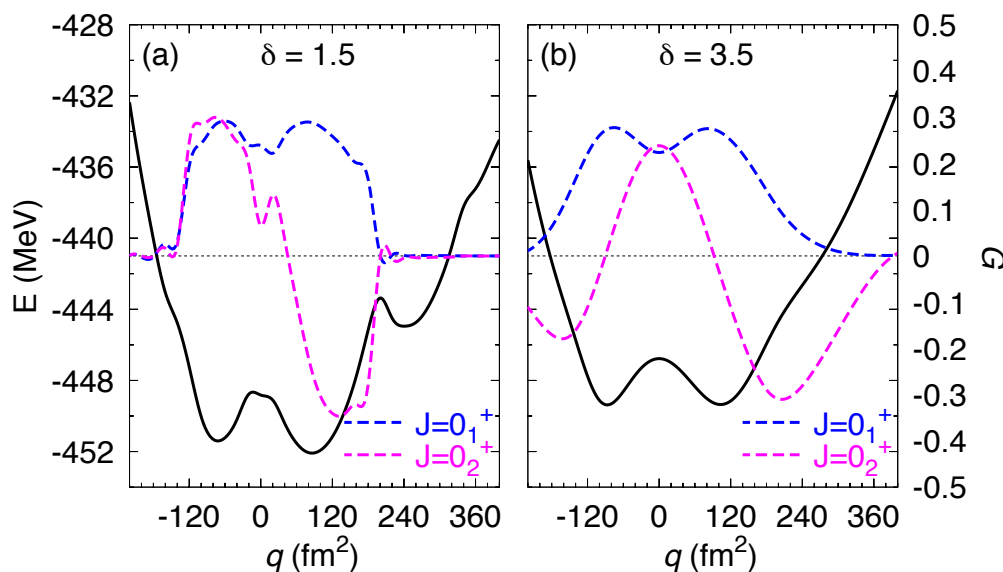
## 8.2. Vibraciones simuladas en dos dimensiones

### 8.2.1. Vibraciones cuadrupolares. Cálculos con acoplo en $q$ y $\delta$ fijo

Empezamos analizando qué ocurre cuando sólo tenemos acoplo en la coordenada  $q$ , como en el caso anterior, pero para otros valores de  $\delta$  distintos a la solución autoconsistente, tomando uno menor y otro mayor y manteniendo estos valores constantes para todo  $q$ . En la figura (8.2) podemos ver los potenciales y las funciones de onda como función de  $q$ , pero en este caso solo para los estados PN-VAP+PNAMP  $0_1^+$  y  $0_2^+$ .

Observamos que el pozo de potencial para el caso  $\delta = 1.5$ , panel (a), está a 2.7 MeV más profundo que el del  $\delta = 3.5$ , panel (b), de modo que cuando se incorporen las correlaciones de apareamiento, las funciones de onda van a estar inhibidas para valores altos de  $\delta$ . Esto significa que en el análisis que vamos a hacer conformando funciones de onda bidimensionales en base

a cálculos 1D, esto es, tomando una de las coordenadas como generadora y haciendo un generador para cada valor fijo de la otra coordenada, no se van a tener en cuenta consideraciones con respecto a la energía sobre qué valores de  $q$  o  $\delta$  son favorecidos o inhibidos. Este efecto va a jugar un papel importante para la interpretación de las funciones de onda en 2D. Por ejemplo, los máximos que encontremos para valores grandes de  $\delta$  es poco probable que se mantengan y aparezcan en la función de onda total.



**Figura 8.2:** Pozos de potencial (línea continua negra) y funciones de onda para los estados  $0_1^+$  (azul) y  $0_2^+$  (magenta) en un cálculo unidimensional en el que la coordenada generadora es  $q$  y se fija el valor de  $\delta = 1.5$ , panel (a) y  $\delta = 3.5$ , panel (b).

A continuación, extendemos el análisis a todos los valores de  $\delta$  que forman la red en la que se realizan los cálculos, pero seguimos sin permitir que interactúen estados con diferente energía de apareamiento. De modo que tenemos 10 valores de  $\delta$  para los que se va a hacer, para cada uno de ellos, un generador de coordenadas de 32 estados, que son el número de valores que tenemos para  $q$ .

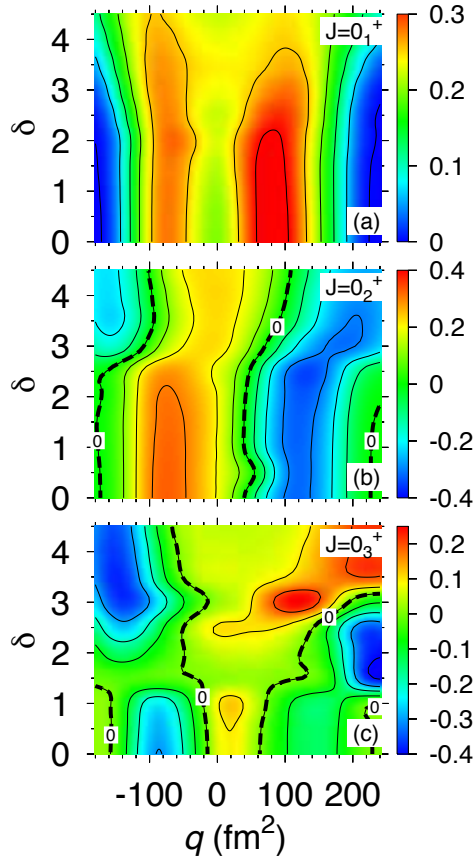
Si resolvemos la ecuación de HW (3.131) para todos los valores de  $\delta$  que se tienen, obtenemos 10 curvas similares a las de la figura (8.2). Estas curvas se pueden fusionar en una y formar una superficie con las coordenadas ( $q$ ,  $\delta$ ). Si la representamos gráficamente, se obtienen las funciones de onda bidimensionales para diferentes estados de la figura (8.3), paneles (a) (b) y (c). Estas superficies son idealizadas puesto que se ha suprimido la interacción entre distintos  $\delta$ . Esto es, las funciones de onda que se observan en la figura

(8.3) son las que se habrían obtenido si hubiésemos resuelto la ecuación de HW en dos dimensiones reales, con acoplo en  $q$  y  $\delta$  pero suponiendo que:

$$\langle q_1 \delta_1 | H \hat{P}^N \hat{P}^J | q_2 \delta_2 \rangle = \langle q_1 \delta_1 | H \hat{P}^N \hat{P}^J | q_2 \delta_1 \rangle \delta_{\delta_2 \delta_1} \quad (8.1)$$

Además para una ecuación HW, como es el caso, hay que asumir también:

$$\langle q_1 \delta_1 | \hat{P}^N \hat{P}^J | q_2 \delta_2 \rangle = \langle q_1 \delta_1 | \hat{P}^N \hat{P}^J | q_1 \delta_2 \rangle \delta_{q_2 q_1} \quad (8.2)$$



**Figura 8.3:** Funciones de onda GCM para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$  (de arriba a abajo) obtenidas combinando generadores en 1D para  $\delta$  fija y con  $q$  como coordenada generadora. Todas son en aproximación PN-VAP+PNAMP y para el núcleo  $^{52}\text{Ti}$ . Consultar el texto principal para una información más detallada.

Es importante notar dos aspectos. En primer lugar, cuando se representa una función de onda bidimensional de un estado excitado y se produce un cambio de signo, esto, va a dar lugar a una línea nodal en vez de observar solo un nodo. En segundo lugar, habrá que distinguir entre esta línea y las



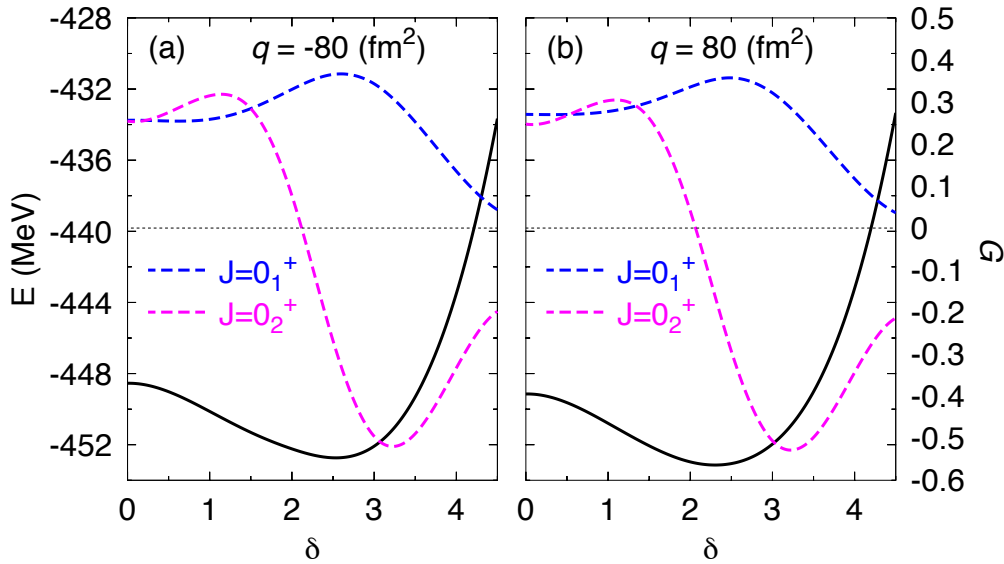
líneas de contorno igual a cero y que nada tienen que ver con una línea nodal, sino que indican las colas de la función de onda cuando caen a cero.

En esta figura, en analogía a lo que ocurriría en el caso unidimensional, se observa una vibración beta de uno o dos fonones para los estados  $0_1^+$  y  $0_2^+$  respectivamente.

### 8.2.2. Vibraciones de apareamiento. Cálculos con acoplamiento en $\delta$ y $q$ fijo

De manera análoga a como se han encontrado las vibraciones cuadrupolares asociadas a la deformación, es posible hacer una búsqueda de otro modo nuclear colectivo de vibración, asociado en este caso al segundo grado de libertad que estamos considerando, lo que se correspondería con una vibración de apareamiento.

Empezamos por el caso más sencillo. Se toma como coordenada generadora  $\delta$  y se mantiene la deformación fija en valores para los que sabemos que la función de onda tiene presencia, en este caso:  $q = 80 \text{ fm}^2$  y  $q = -80 \text{ fm}^2$ . Obtenemos los potenciales y las funciones de onda (a) y (b) de la figura (8.4) respectivamente para esas deformaciones.



**Figura 8.4:** Pozos de potencial (línea continua negra) y funciones de onda para los estados  $0_1^+$  (azul) y  $0_2^+$  (magenta) en un cálculo unidimensional. En los paneles (a) y (b) se fija la deformación en  $q = 80 \text{ fm}^2$  y  $q = -80 \text{ fm}^2$  respectivamente y se utiliza  $\delta$  como coordenada generadora.

La energía viene representada en línea negra continua. En ambos casos, se muestra la forma de un pozo de potencial que decrece suavemente desde  $\delta = 0$  hasta el mínimo en  $\delta \approx 2.5$  y posteriormente crece con bastante pendiente a medida que crece el apareamiento  $\delta$ . Las funciones de onda están representadas por una línea discontinua azul para el estado  $0_1^+$  y magenta para el estado  $0_2^+$ .

Para ambas deformaciones,  $q = \pm 80 \text{ fm}^2$ , el estado fundamental se encuentra en la parte positiva del eje Y, mientras que el primer excitado muestra un nodo, pues corta una vez el eje X. Por lo tanto, este estado se puede interpretar como una vibración de apareamiento.

Después de mostrar un ejemplo de cálculo como función de  $\delta$  y con  $q$  constante, seguimos una argumentación equivalente a la de la subsección 8.2.1. Para cada uno de los 32 valores del intervalo de  $q$  que estamos tomando, se hace un cálculo 1D usando  $\delta$  como coordenada generadora. Es decir, tenemos 32 generadores de 10 puntos cada uno, que unidos, van a conformar una función de onda en 2D que sólo tiene acoplo en  $\delta$ .

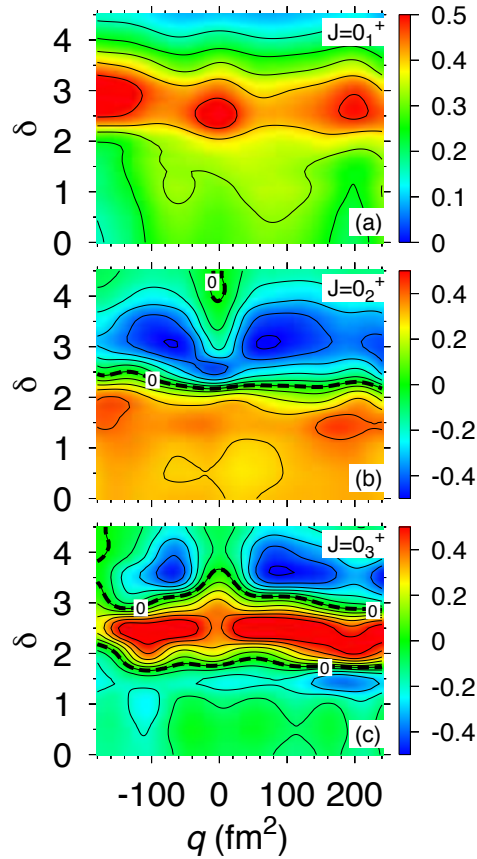
De esta manera, se obtienen las funciones de onda de los paneles (a) (b) y (c) de la figura (8.5) para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$  respectivamente.

En este caso, la analogía con el caso 2D real nos llevaría a que la condición (8.1) sería ahora:

$$\langle q_1 \delta_1 | H \hat{P}^N \hat{P}^J | q_2 \delta_2 \rangle = \langle q_1 \delta_1 | H \hat{P}^N \hat{P}^J | q_1 \delta_2 \rangle \delta_{q_2 q_1}, \quad (8.3)$$

más, de nuevo, la condición dada por (8.2).

El estado fundamental tiene una interpretación clara pues no presenta ningún cambio de signo. En el panel (b), para el estado  $0_2^+$ , se observa una línea nodal a lo largo de  $\delta$  lo que nos indica que tenemos una vibración genuina de apareamiento. El estado  $0_3^+$  se corresponde con una vibración de apareamiento de dos fonones.



**Figura 8.5:** Funciones de onda GCM para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$  (de arriba a abajo) obtenidas combinando generadores en 1D para  $q$  fija y  $\delta$  como coordenada generadora. Consultar el texto principal para una información más detallada.

### 8.3. Funciones de onda 2D reales, en un cálculo completo con acoplo en la deformación y en el apareamiento

Las mismas funciones de onda para el mismo núcleo son representadas ahora para el caso puramente bidimensional, sin hacer ninguna simplificación, en el plano  $(q, \delta)$ , figura (8.6). Las superficies de energía potencial asociadas a estas funciones de onda y que sirven de guía para interpretar las funciones de onda se muestran en la figura (4.3).

Los contornos de la función de onda para el estado  $0_1^+$  se muestran en el panel (a) de la figura (8.6). Encontramos, en fuerte correspondencia con

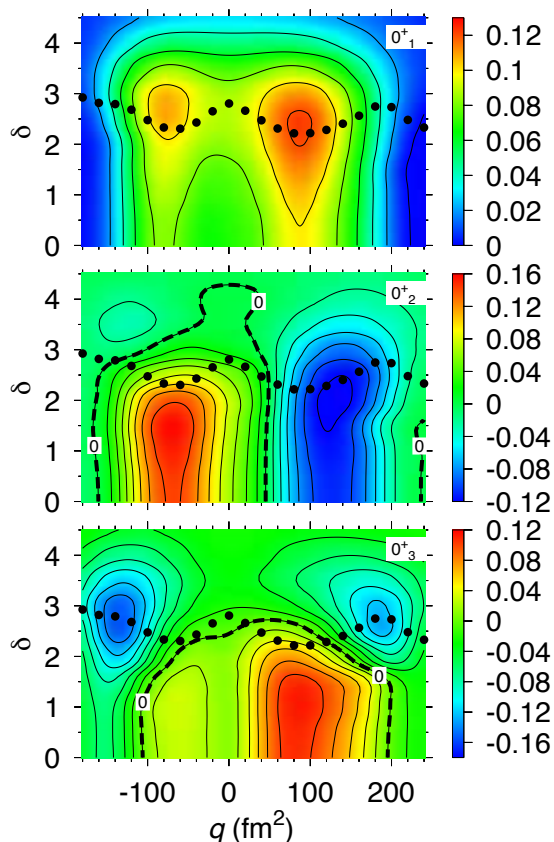
lo que se observa para el potencial, una estructura de dos máximos, aunque ahora se observa una dependencia más suave con el grado de libertad del apareamiento, con predominancia del lado prolate. Las deformaciones a las que se encuentran son casi las mismas que para el caso 1D visto con anterioridad, mientras que los valores de  $\delta$  coinciden prácticamente con la solución autoconsistente, que se puede ver marcada por puntos sobre la figura.

El estado  $0_2^+$ , panel (b) de la figura (8.6), tiene un máximo prolate y un mínimo oblate, siendo ahora mayor en valor absoluto este último. Estos extremos están ahora en valores de  $\delta$  menores que para el estado  $0_2^+$ . Hay un cambio de signo entre el máximo positivo en  $q \approx -60 \text{ fm}^2$  y el mínimo que toma valores negativos en  $q \approx 140 \text{ fm}^2$ . Se encuentran separados por una línea nodal en  $q \approx 40 \text{ fm}^2$ , por lo que este estado, se puede interpretar como una vibración  $\beta$  en dos dimensiones. Conviene hacer la distinción entre esta línea y la línea de contorno igual a cero que se observa aproximadamente para  $-160 \text{ fm}^2$  y  $220 \text{ fm}^2$  y que no es parte de la línea nodal, sino que indica que es la cola de la función de onda cuando cae a cero.

En el panel (c) está la función de onda para el estado  $0_3^+$ . Se ve una estructura de tres picos: dos con valores negativos para formas muy deformadas y con grandes correlaciones de apareamiento (uno prolate y otro, el más intenso de los tres, oblate). El tercero, con valores positivos, se encuentra en  $80 \text{ fm}^2$  y con valores bajos de apareamiento ( $0 < \delta < 1.5$ ).

Las posiciones a las que se encuentran los máximos con respecto a la coordenada  $q$  son similares a lo que se ha obtenido para el caso unidimensional. El hecho de que los picos que se dan para grandes deformaciones tengan fuertes correlaciones de apareamiento es debido a que para esas deformaciones la densidad de niveles es alta y el hecho de permitir al sistema moverse en la coordenada  $\delta$  dado un  $q$  fijo le permite a los estados colectivos moverse a zonas con diferente apareamiento.

En esta función de onda encontramos dos partes diferenciadas marcadas por la línea nodal. Una está formada por dos segmentos perpendiculares al eje  $q$ , uno en  $q \approx -100 \text{ fm}^2$  y otro en  $q \approx 200 \text{ fm}^2$ . Esta zona puede asociarse con una vibración beta de dos fonones. En la otra parte, la línea nodal es curvada, más o menos paralela al eje  $q$  y puede ser asociada a una vibración de apareamiento. Por tanto, este estado no puede interpretarse como una vibración pura de apareamiento.



**Figura 8.6:** Funciones de onda colectivas para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$ , de arriba a abajo, del  $^{52}\text{Ti}$  en cálculos 2D y en la aproximación PN-VAP+PNAMP. Obsérvese que la escala de la deformación ha sido reducida en relación a la que hemos empleado regularmente, para obtener mejor resolución en la zona de interés donde se localiza la intensidad de la función de onda. Los contornos se corresponden con intervalos de separación 0.02 y la línea discontinua más gruesa marca los ceros de las funciones de onda.

Para tratar de entender lo que ocurre con la vibración pura de apareamiento hacemos el siguiente análisis. El objetivo es comparar las funciones de onda completas de un cálculo en 2D, figura (8.6) con las obtenidas de una forma artificial, que hemos explicado anteriormente, acoplando  $\delta$  o  $q$  por separado, figuras (8.3, 8.5).

Es importante hacer primero la siguiente consideración; la normalización de las funciones de onda es diferente si se trata de la función de onda bidimensional estándar  $\sum_{\delta,q} |G(q\delta)|^2 = 1$ ; o si es para las construidas con  $q$  fijo,  $\sum_q |G(q\delta)|^2 = 1$ ; o  $\delta$  fijo,  $\sum_{\delta} |G(q\delta)|^2 = 1$ . Esto va a producir un efecto que consiste en que las funciones de onda se estiran. Así, para  $\delta$  fijo, figura (8.3),

las funciones de onda se expanden a lo largo del eje Y, obteniendo intensidad de las funciones de onda en valores inusualmente grandes de las correlaciones de apareamiento, como puede verse en la figura. Del mismo modo, para el caso de  $q$  fijo, las funciones de onda se estiran en la dirección del eje X, panel izquierdo de la figura (8.5).

Si nos centramos ya en dicha comparación, vemos que el estado fundamental  $0_1^+$  del cálculo completo en 2D, panel (a) (8.6), tiene dos máximos, el mayor en  $+80 \text{ fm}^2$  y otro, menor y oblate en  $-80 \text{ fm}^2$ . Esta estructura se da para el estado fundamental de los cálculos con  $q$  como coordenada generadora, panel (a) figura (8.3). Si bien, como ya se ha explicado, los máximos se extienden para un rango muy grande de valores de  $\delta$ .

El mismo estado pero con el apareamiento como coordenada, panel (a) de figura (8.5), muestra un patrón diferente. Hay tres máximos; uno para la forma esférica y otros dos para grandes deformaciones  $\pm 200 \text{ fm}^2$  lo cual se corresponde con una situación en la que la densidad de niveles es alta, lo que favorece correlaciones de apareamiento grandes. Esta función de onda no se corresponde con la función de onda completa en 2D. Sin embargo, si la observamos junto a la anterior, es fácil visualizar que cuando se considera el apareamiento, se modula la función de onda que se obtiene para el caso en el que se toma  $q$  como coordenada generadora, suprimiendo, por ejemplo, valores de delta próximos a cero y mayores a 4, hasta obtener la imagen del caso completo 2D, figura (8.6)(a).

El estado  $0_2^+$  para la función de onda completa, panel (b) de la figura (8.6), se parece de nuevo al mismo estado con  $q$  como coordenada generadora, panel (b) de la figura (8.3), salvo porque, en este caso, hay una fuerte supresión de valores altos de  $\delta$ .

Sin embargo, la vibración genuina de apareamiento del panel (b) de la figura (8.5), no presenta una equivalencia directa con el segundo estado excitado, como podría esperarse, del caso completo 2D mostrado en el panel (c) de la figura (8.6).

Por último, el estado  $0_3^+$  de la función de onda completa, panel (c) de la figura (8.6) para los cálculos 2D, se puede interpretar como la mezcla de una vibración beta de dos fonones (figura (8.3) (c)) y una vibración de apareamiento (figura (8.5) (b)).

El estado  $0_3^+$  del panel (c) de la figura (8.3) es una vibración beta de dos fonones que no parece tener un claro homólogo en la función de onda total como ocurre para los estados anteriores. Sin embargo, es fácil observar que si se toma el corte para  $\delta = 2.5$ , valor que se corresponde aproximadamente

con el de la solución autoconsistente, se obtiene una estructura de parecida a la del mismo estado en una dimensión, línea verde del panel (a) de la figura (8.1).

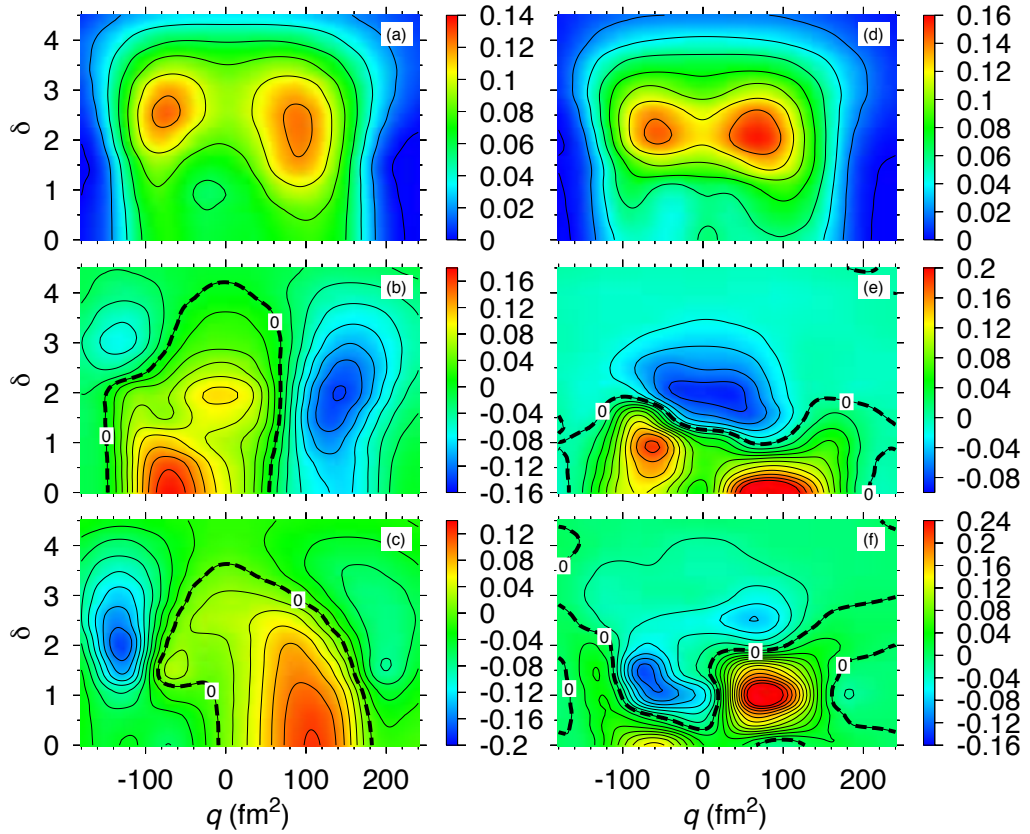
La vibración  $\beta$ , panel (c) de la figura (8.3), tiene una estructura principal de 4 picos aproximadamente en los siguientes valores de  $q$ :  $-140, -90, +100$  y  $+220 \text{ fm}^2$ . Mientras que la vibración de  $\delta$ , panel (b) de la figura (8.5), presenta una distribución de dos picos en  $-160$  y  $+180$  y otros dos en  $-50$  y  $+50 \text{ fm}^2$ . Se puede inferir, que una combinación de ambas estructuras de nodos en una sola, de forma energéticamente eficiente, pasa por favorecer los dos picos de grandes deformaciones (sacando provecho de tener una densidad de niveles grande) a zonas de grandes correlaciones de apareamiento y los dos de deformaciones pequeñas a zonas de pequeñas correlaciones de apareamiento. Los dos picos oblates (lo mismo se da para los prolates) de grandes deformaciones provenientes de ambos modos se funden en uno y lo mismo para los picos a pequeñas deformaciones. El resultado de esta combinación es el estado  $0_3^+$  que se observa para el cálculo completo en 2D.

De esta discusión podemos concluir que es el grado de libertad cuadrupolar el que proporciona la parte principal de la estructura de la función de onda. Las posiciones de los puntos singulares en la coordenada  $q$  están moderadamente influenciados por el grado de libertad del apareamiento. Si miramos la solución autoconsistente marcada en las funciones de onda, observaremos que apenas hay variaciones en el contenido de apareamiento, manteniendo un valor casi constante en torno a  $\delta \approx 2.5 - 3.0$ . Esto no es así para el caso 2D completo, en concreto para el estado  $0_3^+$  candidato a ser una vibración de apareamiento. Lo que se deduce de las figuras de las funciones de onda con acoplamiento en  $\delta$  y  $q$  simultáneamente y las funciones de onda con el acoplo separado en cada una de las variables, es que la vibración de apareamiento de un fonón se mezcla con la vibración beta de dos fonones hasta que ambas se acomodan en una función de onda resultante con diferente intensidad en el apareamiento.

Por tanto, la presencia de vibraciones de apareamiento genuinas está fuertemente inhibida por el modo cuadrupolar, que es el que claramente modula la estructura de la función de onda.

## 8.4. Funciones de onda en 2D para diferentes aproximaciones

Por último, se presentan las funciones de onda bidimensionales equivalentes a las de la figura 8.6, analizadas en la sección anterior pero para los casos derivados de funciones de onda intrínsecas tipo HFB.



**Figura 8.7:** Funciones de onda colectivas en 2D, análogas a las de la figura 8.6, para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$  y  $0_3^+$  (de arriba a abajo) pero en las aproximaciones HFB+PNAMP y HFB+AMP (en columnas). Los contornos se corresponden con intervalos de separación 0.02 y la línea discontinua más gruesa marca los ceros de las funciones de onda.

En los paneles (a), (b) (c) de la figura 8.7, encontramos las funciones de onda HFB+PNAMP para los estados  $0_1^+$ ,  $0_2^+$ ,  $0_3^+$  respectivamente. Si se tienen en cuenta las superficies de energía potencial, panel (e) de la figura (4.3), las funciones de onda 1D para esta aproximación, panel (b) figura (8.1) y la discusión que se ha hecho para el caso PN-VAP+PNAMP en 2D no hay



prácticamente nada nuevo que aportar a la hora de interpretar estas funciones de onda. La principal diferencia con lo obtenido para el caso anterior, es que la vibración beta para el estado  $0_2^+$ , y en menor medida también el estado  $0_3^+$ , no son tan puras como en el caso anterior.

Las funciones de onda HFB+AMP se encuentran en los paneles (d), (e), (f) de la figura 8.7. De nuevo, es la aproximación donde encontramos las diferencias más acusadas comparadas con las otras dos. Para el estado  $0_1^+$  encontramos una clara similitud con los otros dos estados fundamentales mostrados. Presenta una estructura de dos máximos, aunque ahora son más intensos y están localizados para valores más cercanos entre ellos de  $q$  y para valores menores de  $\delta$ . Los estados  $0_2^+$  y  $0_3^+$  parecen ser el resultado de una mezcla de los que se observan en las aproximaciones con proyección al número de partículas. Estas funciones de onda están más comprimidas en la variable  $\delta$ , dando la impresión de que son empujadas hacia valores bajos de correlaciones de apareamiento y no se encuentran picos para las grandes deformaciones, como se veía en los otros casos. La tendencia que observamos, es que la concentración de la función de onda es mayor cuando la aproximación que se utiliza para obtenerlas es de menor calidad. Para ver este efecto de manera cuantitativa se muestran en la tabla (8.1) los máximos (en valor absoluto) de las funciones de onda.

Función de onda	$0_1^+$	$0_2^+$	$0_3^+$
PN-VAP+PNAMP	0.125	0.158	0.198
HFB+PNAMP	0.133	0.183	0.295
HFB+AMP	0.161	0.200	0.357

**Tabla 8.1:** Valores máximos de  $G$  en valor absoluto para las funciones de onda colectivas representadas en las figuras (8.6) y (8.7).

Es interesante notar que, mientras que las superficies de potencial que se corresponden a estos tres casos, paneles (d), (e) y (f) de la figura (4.3), tienen un aspecto similar entre sí, las funciones de onda HFB+AMP son bastante diferentes a las de las otras aproximaciones. Esto está relacionado, por un lado con los elementos no diagonales del solape del hamiltoniano y las correlaciones dinámicas que va a dar el método GCM y por otro, con el solape de la norma y la dependencia lineal de los estados que forman la base.



# Capítulo 9

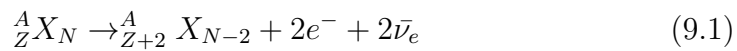
## Desintegración doble beta sin emisión de neutrinos

### 9.1. Introducción

Uno de los principales retos en la física nuclear y de partículas hoy en día es determinar si los neutrinos son partículas tipo Dirac o Majorana y relacionado de manera directa con este asunto, está la cuestión de la detección de las desintegraciones doble beta sin emisión de neutrinos [127].

La desintegración doble beta es un proceso mediado por la interacción débil y que se caracteriza por ser muy lento. Se da entre dos isóbaros par-par, uno decae en otro que tiene dos protones más y dos neutrones menos, cuando una desintegración sólo beta está energéticamente prohibida. Esta situación se da para una treintena de núcleos, a pesar de que debido a los largos tiempos de vida asociados a estas desintegraciones, solo serán adecuados para su detección aquellos que tengan un valor factor  $Q_{\beta\beta}$  grande. Además, los núcleos iniciales deben ser lo suficientemente abundantes para poder llevar a cabo el experimento.

Se puede distinguir dos casos de desintegraciones doble beta. Las reacciones nucleares correspondientes son las siguientes:



En el primer modo de desintegración, propuesto inicialmente por Goeppert-Mayer [128], se emiten dos electrones y dos neutrinos ( $2\nu\beta\beta$ ). Es un proceso de segundo orden mediado por la interacción débil, por lo que la probabilidad para que ocurra es baja, conserva el número leptónico y es compatible con

que los neutrinos sean partículas tipo Dirac o Majorana. La primera detección en un laboratorio data de 1987 [129]. Desde entonces, se ha medido para una docena de núcleos [130].

La otra alternativa, ecuación 9.2, es la desintegración doble beta sin emisión de neutrinos ( $0\nu\beta\beta$ ), [131]. Este proceso en el que el número leptónico no se conserva solamente es posible si los neutrinos son partículas de Majorana, esto es, que los neutrinos son a la vez su propia antipartícula. Este caso sería particularmente interesante desde el punto de vista teórico ya que tendría importantes consecuencias en la física de partículas, pues este proceso implica, por ejemplo, que los neutrinos tendrían que tener masa y que el número leptónico no se conserva, ambos conceptos no compatibles con el Modelo Estándar.

La desintegración  $0\nu\beta\beta$  resulta ser la mejor manera para detectar un proceso en el que se viole la conservación del número leptónico y por tanto, de establecer el carácter tipo Majorana de los neutrinos. Además, los experimentos de oscilaciones de neutrinos demuestran que estas partículas elementales tienen masa y proporcionan una medida de las diferencias entre las masas de los distintos autoestados de masa. La detección de la desintegración  $0\nu\beta\beta$  permitiría establecer una escala absoluta para dichas masas y, dependiendo de dicha escala, su jerarquía [127].

Sin embargo, salvo en la aseveración muy controvertida efectuada por parte de la colaboración del experimento de Heidelberg-Moscow [132] y que ha sido recientemente casi descartada por los resultados de GERDA [133], la desintegración  $0\nu\beta\beta$  no ha sido observada todavía, de manera que por un lado tenemos el reto experimental para detectar dicho proceso. Este objetivo no es fácil dado que es necesario tener un fondo extremadamente bajo para diferenciar los escasos eventos del ruido. Actualmente varios experimentos como EXO-200 [134], KamLAND-Zen [135], GERDA [133, 136, 137], CANDLES [138], COBRA [139], Majorana [140], NEMO-3 [141], SNO+ [142], AMoRE [143], CUORICINO [144], CUORE [145], NEXT-DEMO [146] ya están en marcha o en avanzado estado de desarrollo.

Los candidatos más plausibles para detectar la desintegración  $0\nu\beta\beta$  de acuerdo a su alto factor  $Q_{\beta\beta}$  son los siguientes:  $^{48}\text{Ca}$ ,  $^{76}\text{Ge}$ ,  $^{82}\text{Se}$ ,  $^{96}\text{Zr}$ ,  $^{100}\text{Mo}$ ,  $^{116}\text{Cd}$ ,  $^{124}\text{Sn}$ ,  $^{128}\text{Te}$ ,  $^{130}\text{Te}$ ,  $^{136}\text{Xe}$ ,  $^{150}\text{Nd}$ .

Como se verá en la sección 9.2, la semivida, y la vida media, de este proceso es proporcional al elemento de matriz nuclear (nuclear matrix element, NME) entre los estados inicial y final. Dichos NME tienen que determinarse teóricamente de la manera más precisa posible por dos motivos principalmente. El primero de ellos es que, en ausencia de resultados experimentales, la elección de los núcleos más adecuados para tratar de detectar el proceso dependerá de

si el NME es grande o pequeño. El segundo motivo es que si finalmente se obtiene una señal experimental, el valor final y la incertidumbre de la masa efectiva del neutrino dependerá del NME.

Hasta la fecha, los elementos de matriz nuclear han sido calculados utilizando diferentes métodos de estructura nuclear como: la QRPA [147–151]; el modelo de capas (ISM) [152–154]; el modelo de bosones interactuantes (IBM) [155, 156], el método de Hartree-Fock proyectado (PHFB) [157] y el método de funcionales de la densidad de energía (energy density functional, EDF) [158–160].

En este capítulo se estudian los NME para la desintegración doble beta (double beta decay, DBD) para los 11 candidatos mencionados anteriormente en el marco de las teorías más allá de campo medio autoconsistente con restauración de simetrías y mezcla de configuraciones tomando como grados de libertad, el gap de apareamiento y la deformación. Todos los cálculos de este capítulo están exclusivamente desarrollados para la aproximación PN-VAP+PNAMP y haciendo uso del método GCM. En este caso, el espacio de configuración se ha ampliado, con respecto a los cálculos mostrados con anterioridad a este punto. Se han tomado 11 capas mayores de oscilador. La coordenada asociada a la deformación o forma nuclear en este caso va a estar descrita en el plano  $\beta, \gamma$  [33], en lugar de ser la variable  $q$  utilizada hasta ahora. Sin embargo, ambas están relacionadas de la siguiente forma [58]:

$$\langle \phi | \hat{Q}_{20} | \phi \rangle = \beta \cos \gamma \frac{3r_0^2 A^{5/3}}{\sqrt{20\pi}} \quad (9.3)$$

Nuestros cálculos son axiales, de modo que  $\gamma = 0$ ,  $A$  es el número másico y  $r_0 = 1.2$  fm. El rango que toma  $\beta$  varía ligeramente entre los candidatos, pero típicamente van desde -0.8 hasta 0.9 con intervalos de 0.05 mientras que el rango de  $\delta$  va de 0.5 hasta 6.5 en intervalos de 0.5. De modo que tenemos del orden de 400 estados intrínsecos para cada uno de los núcleos que queremos describir.

El apareamiento es un elemento fundamental en la existencia de una desintegración doble beta, ya que es esta interacción la que hace que la energía de los núcleos par-par baje. Esto hace que se cree una desintegración doble beta energéticamente más favorable entre dos núcleos con esta característica a que ocurra una sola desintegración beta pasando por el núcleo vecino impar-impar. La sensibilidad del operador de transición con las correlaciones de apareamiento ha sido previamente descrita [148, 151, 153, 158]. Sin embargo, en este trabajo se estudia por primera vez en los elementos de matriz nuclear la influencia de las correlaciones de apareamiento y de deformación cuando

éstas son tratadas al mismo nivel, incluyendo la posibilidad de mezcla de configuraciones.

## 9.2. Marco Teórico

La semivida del proceso de desintegración doble beta sin emisión de neutrinos entre estados  $0^+$  viene dada por la expresión [127]:

$$[T_{1/2}^{0\nu}(0^+ \rightarrow 0^+)]^{-1} = G_{01} |M^{0\nu}|^2 \left( \frac{\langle m_\nu \rangle}{m_e} \right)^2, \quad (9.4)$$

donde:

- $G_{01}$  es un factor de fase cinemático que depende de la carga, masa y energía disponible en el proceso [161].
- $m_e$  es la masa del electrón.
- $\langle m_\nu \rangle$  es la masa efectiva del neutrino de Majorana. Se define como:  $\langle m_\nu \rangle = |\sum_k U_{ek}^2 m_k|$ , siendo  $m_k$  la combinación de las masas del neutrino que da la matriz de mezcla  $U$ .
- $M^{0\nu}$  es el elemento de matriz nuclear (NME), esto es, el elemento de matriz del operador para una desintegración  $0\nu\beta\beta$  entre los estados iniciales y finales de los núcleos.

Si tenemos en cuenta la aproximación de cierre para hacer la suma en los estados intermedios del núcleo impar-impar [127], el NME para la desintegración  $0\nu\beta\beta$ , se calcula como un valor esperado entre un operador a dos cuerpos entre los estados iniciales y finales:

$$M^{0\nu} = \langle 0_f^+ | \hat{M}^{0\nu} | 0_i^+ \rangle \quad (9.5)$$

$\hat{M}^{0\nu}$  consta de tres términos: Fermi (F), Gamow-Teller (GT) y Tensor (T):

$$M^{0\nu} = - \left( \frac{g_V}{g_A} \right)^2 M_F^{0\nu} + M_{GT}^{0\nu} - M_T^{0\nu} \quad (9.6)$$

Se toman en este caso como valores de las constantes:  $g_V = 1$  y  $g_A = 1.25$ .  $\hat{M}_{F/GT/T}$  son los operadores a dos cuerpos de Fermi, Gamow-Teller y Tensor respectivamente. El término tensor, que tiene una pequeña contribución [150, 153], no es tenido en cuenta en estos cálculos.

Los operadores F y GT se definen como:

$$\hat{M}_F^{0\nu} = \hat{V}_F(r) \hat{t}_-^{(1)} \hat{t}_-^{(2)} \quad (9.7)$$

$$\hat{M}_{GT}^{0\nu} = \hat{V}_{GT}(r) (\hat{\sigma}_1^1 \hat{\sigma}_2^2) \hat{t}_-^{(1)} \hat{t}_-^{(2)} \quad (9.8)$$

donde:  $\hat{t}_-$  es el operador escalera de isospín que permite cambiar neutrones por protones;  $\hat{\sigma}$  son las matrices de Pauli que actúan sobre la parte de espín;  $\langle \hat{r}_1 \hat{r}_2 | \hat{V}_{F/GT} | \hat{r}_1 \hat{r}_2 \rangle = v_{F/GT}(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$ , son los potenciales locales que dependen de la coordenada relativa de los nucleones implicados en la desintegración y  $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$ .

Las funciones  $v_{F/GT}(r)$  que aparecen en la expresión anterior, son los potenciales de neutrino [153] y tienen la forma:

$$v_{F/GT}(r) = \frac{2 r_0 A^{1/3}}{\pi g_A^2} \int_0^\infty j_0(qr) \frac{h_{F/GT}(q)}{q + \mu} q dq, \quad (9.9)$$

donde  $r$  es la distancia entre nucleones;  $r_0$  y  $A$  ya han sido definidas en la ecuación (9.3);  $g_A = 1.25$ ;  $\mu = 10.22$  MeV;  $q$  es el momento transferido;  $h_{F/GT}$  es el factor de forma y  $j_0(qr)$  la función esférica de Bessel. El parámetro  $\mu$  depende de cada desintegración y es una energía promedio de los estados intermedios del núcleo impar-impar [162, 163].

En el cálculo de los NMEs, es necesario tener en cuenta las correlaciones de corto alcance (short range correlations, SRC) consideradas en el operador de la transición. Para incluirlas de manera totalmente consistente, se tendría que renormalizar el operador  $0\nu\beta\beta$  usando la misma prescripción que para la interacción desnuda. Sin embargo, esta prescripción general no se pueden emplear cuando se usan interacciones fenomenológicas efectivas (como en este caso y en los métodos usados habitualmente). Por lo tanto, las SRC también se incluyen de manera fenomenológica usando diferentes parametrizaciones, en particular:

a) Funciones tipo Jastrow [164]:

En este caso el NME se modifica mediante una transformación unitaria de la siguiente manera:

$$\langle 0_i^+ | v(r) | 0_f^+ \rangle_{src} = \langle 0_i^+ f(r) | v(r) | f(r) 0_f^+ \rangle = \langle 0_i^+ | f(r)^2 v(r) | 0_f^+ \rangle, \quad (9.10)$$

con  $f(r) = 1 - e^{-ar^2}(1 - br^2)$  y  $a = 1.1 \text{ fm}^{-2}$ ;  $b = 0.68 \text{ fm}^{-2}$ .

b) *Unitary correlation operator method* (UCOM) [165]:

En este caso el NME, es modificado por un operador de traslación de la siguiente manera:

$$\langle 0_i^+ | v(r) | 0_f^+ \rangle_{src} = \langle 0_i^+ | v(\tilde{r}) | 0_f^+ \rangle \quad (9.11)$$

donde

$$\tilde{r} = r \left( 1 + e^{-\frac{r}{\beta}} \frac{\alpha}{r} \left( \frac{r}{\beta} \right)^\eta \right), \quad (9.12)$$

con  $\alpha = 1.3793$  fm ;  $\beta = 0.8853$  fm y  $\eta = 0.3724$

En este trabajo, las SRC son implementadas dentro del método UCOM. Las correcciones que ofrece este método son más suaves [166] que las dadas por el primero.

Para encontrar los elementos de matriz nuclear hace falta describir las funciones de onda de los estados fundamentales de los estados iniciales y finales  $|0_{i/f}^+\rangle$ , que aparecen en la ecuación (9.5) y entre las que se van a evaluar los términos explicados anteriormente.

Como ya se ha visto en anteriores capítulos, una vez que se resuelve la ecuación de HW, cualquier observable como la energía, las probabilidades de transición electromagnéticas o los radios cuadráticos medios pueden ser calculados [13]. En particular, también es posible evaluar el valor esperado para los operadores  $\hat{M}_{FGT}^{0\nu}$  (consultar el apéndice E para más detalle).

Los estados involucrados en una transición van a venir dados por la ecuación (3.130) :

$$|J_{i/f}^{+\sigma}\rangle = \sum_{\beta, \delta} f_{i/f}^{NZJ\sigma}(\beta, \delta) |\Phi_{i/f}^J(\beta, \delta)\rangle, \quad (9.13)$$

donde  $J$  va a ser el momento angular;  $\sigma$  de nuevo, etiqueta de menor a mayor energía los estados excitados para el mismo momento angular;  $\beta$  y  $\delta$  son los grados de libertad del momento cuadrupolar axial y del apareamiento respectivamente;  $f_{i/f}^{NZJ\sigma}(\beta, \delta)$  son los coeficientes que se obtienen al resolver la ecuación (3.136). Las funciones de onda proyectadas vienen dadas por (3.141):

$$|\Phi_{i/f}^J(\beta, \delta)\rangle = P^{N_{i/f}} P^{Z_{i/f}} P^J |\phi(\beta, \delta)\rangle, \quad (9.14)$$

donde  $P^{N(Z)}$  y  $P^J$  son los proyectores del número de protones (neutrones) y del momento angular respectivamente. Ya que la desintegración se da entre los estados fundamentales de los núcleos iniciales y finales, estamos interesados en obtener la solución para el estado fundamental, esto es, en la ecuación (9.13), tenemos  $J = 0$  y  $\sigma = 1$ .

Los elementos de matriz de la transición entre los estados proyectados vendrá dado por:



$$M_{F/GT}^{0\nu}(\beta, \delta; \beta', \delta') = \frac{\langle \Phi_f^{J=0}(\beta, \delta) | \hat{M}_{F/GT}^{0\nu} | \Phi_i^{J=0}(\beta', \delta') \rangle}{\langle \Phi_i^{J=0}(\beta, \delta) | \Phi_i^{J=0}(\beta, \delta) \rangle^{1/2} \langle \Phi_f^{J=0}(\beta', \delta') | \Phi_f^{J=0}(\beta', \delta') \rangle^{1/2}}$$

### 9.3. Un ejemplo: La desintegración $^{136}\text{Xe}$

Discutimos en detalle la desintegración del  $^{136}\text{Xe} \rightarrow ^{136}\text{Ba}$  para ilustrar el método que estamos utilizando. Empezamos analizando las superficies de energía potencial proyectadas definidas como:

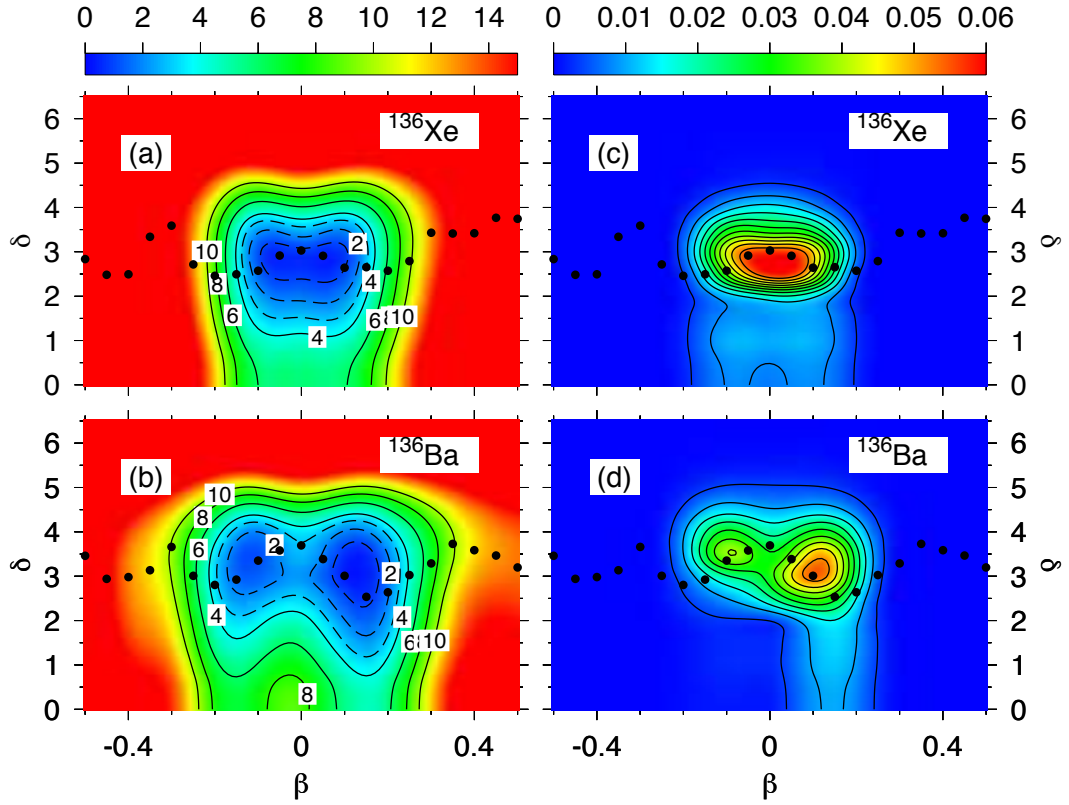
$$E^{J=0}(\beta, \delta) = \frac{\langle \Phi^{J=0}(\beta, \delta) | \hat{H} | \Phi^{J=0}(\beta, \delta) \rangle}{\langle \Phi^{J=0}(\beta, \delta) | \Phi^{J=0}(\beta, \delta) \rangle} \quad (9.15)$$

Se muestran en la figura (9.1). Panel (a) para el  $^{136}\text{Xe}$  y panel (b) para el  $^{136}\text{Ba}$ . Las líneas a trazos y continuas delimitan contornos separados 1 MeV y 2 MeV respectivamente.

Para el núcleo  $^{136}\text{Xe}$  obtenemos una superficie equipotencial más o menos simétrica en torno al caso esférico, con dos mínimos degenerados en  $\beta = \pm 0.05$  y  $\delta = 3$ . La superficie tiene una gran pendiente y la energía aumenta significativamente cuando se aumenta la deformación o el apareamiento, en particular para valores superiores de  $\beta = \pm 0.15$  y  $\delta \approx 4$ .

La superficie para el  $^{136}\text{Ba}$  es más ancha en las direcciones marcadas por ambas coordenadas. Presenta dos mínimos; el mínimo absoluto es prolate y se encuentra en ( $\beta = 0.15$ ,  $\delta = 3$ ); el otro es oblate y está localizado en ( $\beta = -0.10$ ,  $\delta = 3.5$ ). En este caso, se aprecia que el mínimo absoluto es más suave en la dirección de  $\delta$ , mientras que la energía en este núcleo crece considerablemente en la zona de valores  $\beta > \pm 0.2$  y  $\delta > 5$ .

Las superficies de energía, presentan una zona blanda que se extiende para deformaciones  $-0.2 < \beta < 0.2$  y  $1 < \delta < 4$ . Es interesante resaltar que toda esta información relevante sobre las correlaciones de apareamiento no está contenida en un cálculo 1D en la dirección  $\beta$ , como puede verse en la solución autoconsistente marcada por los puntos en la superficie de potencial. Sin embargo, puede desempeñar un papel importante en la descripción de la estructura final de los estados en los que estamos interesados.



**Figura 9.1:** Izquierda: superficies de energía potencial proyectadas a momento angular  $J = 0$  y al número de partículas para los núcleos  $^{136}\text{Xe}$  (a) y  $^{136}\text{Ba}$  (b). Las líneas discontinuas separan contornos de 1 MeV y las las continuas de 2 MeV y las superficies están normalizadas con respecto a su correspondiente mínimo absoluto. Derecha: Funciones de onda colectivas al cuadrado,  $^{136}\text{Xe}$  (c) y  $^{136}\text{Ba}$  (d). Los puntos marcan el camino de la solución autoconsistente de  $\delta$  a lo largo de la dirección  $\beta$ .

Completamos la descripción de los estados fundamentales de estos núcleos con las funciones de onda colectivas. Éstas vienen dados por la expresión (3.141).

$$|G^{J=0;\sigma=1}(\beta, \delta)|^2 = \left| \sum_{\beta', \delta'} f^{NZJ=0;\sigma=1}(\beta', \delta') \langle \Phi^{J=0}(\beta, \delta) | \Phi^{J=0}(\beta', \delta') \rangle^{1/2} \right|^2 \quad (9.16)$$

Estas funciones de onda se pueden ver en la figura (9.1), panel (c) para el estado fundamental del núcleo  $^{136}\text{Xe}$  y (d) para el correspondiente al núcleo  $^{136}\text{Ba}$ . Para el primero se encuentra una distribución prácticamente esférica, en la misma posición para las que se obtenían los mínimos de la superficie de energía potencial. Esta distribución es consistente con el cierre que presenta

este núcleo en neutrones para el número mágico  $N=82$ .

Para el estado fundamental del  $^{136}\text{Ba}$  obtenemos dos máximos situados en las mismas posiciones en las que se situaban los mínimos de los pozos de potencial para este núcleo, aunque tenemos mayor concentración de la función de onda en la zona prolate.

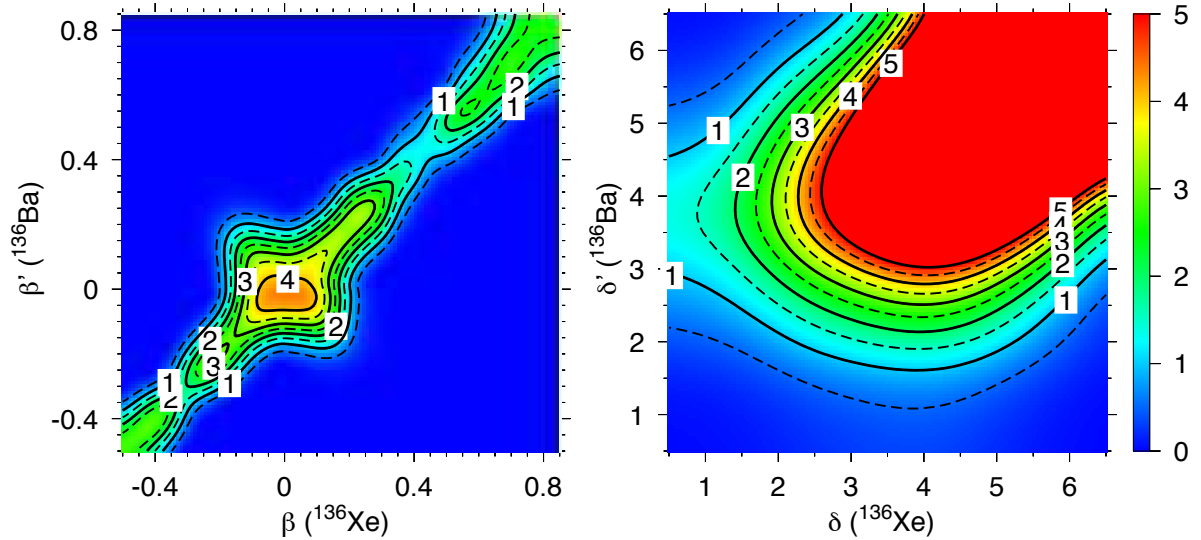
En general, podemos decir que obtenemos pesos grandes para las funciones de onda en el intervalo ( $\delta = 2 - 4$ ) y esta mezcla en el apareamiento no se tiene en cuenta en un cálculo unidimensional, por lo que esperamos unos elementos de matriz ligeramente diferentes cuando se incluya el apareamiento como veremos a continuación.

Con las funciones de onda calculadas, evaluamos ahora los elementos de matriz nuclear de la expresión (9.15) y estudiamos su dependencia con las variables elegidas. Vamos a analizar en la figura (9.2), por separado, la influencia de ambos grados de libertad en los NMEs para el término GT (el término F presenta un comportamiento muy parecido pero con valores menores por lo que no se muestra aquí).

Primero tomamos los valores de  $\delta$  para los que se encuentra el mínimo de las funciones de onda mostradas en la figura (9.1) del estado inicial ( $\delta = 3$ ) y del estado final ( $\delta' = 3$ ) y se hace una representación de los NMEs como función de la deformación cuadrupolar para ambos estados en el panel (a) de la figura (9.2). Se observa que la intensidad de la transición está localizada en la parte diagonal de la figura donde los estados iniciales y finales tienen deformaciones similares. Esto implica que la desintegración doble beta sin emisión de neutrinos es más probable que se dé en esta situación siendo las configuraciones esféricas las más favorecidas pues es donde se localiza en máximo. También se encuentran valores significativamente altos alrededor de la forma esférica para valores fuera de la diagonal y con configuración ( $\beta = -\beta'$ ).

A continuación, estudiamos la dependencia con las fluctuaciones de apareamiento de los elementos de matriz nucleares. Es decir, como depende la probabilidad de que el proceso nuclear suceda con respecto al contenido de apareamiento de las funciones de onda inicial y final. Hacemos una representación análoga a la del caso anterior. En este caso se toman fijos los valores de deformación donde las funciones de onda colectivas presentan el máximo ( $\beta = \beta' = 0.1$ ) y se toman como variables  $\delta$  y  $\delta'$ , panel (b) de la figura (9.2). Observamos que los NMEs tienen valores casi despreciables para valores de  $\delta$  o  $\delta'$  inferiores a dos. Sin embargo, para valores mayores, éstos crecen rápidamente a medida que se incrementa el valor del apareamiento. Se observa también que la distribución es bastante ancha lo que implica que la mezcla

de estados con diferente apareamiento, va a jugar un importante papel en la descripción de los elementos de matriz nuclear.



**Figura 9.2:** Elementos de matriz nuclear proyectados a buen momento angular y buen número de partículas en función de la deformación (a) y del apareamiento (b) para los estados iniciales  $^{136}\text{Xe}$  y finales  $^{136}\text{Ba}$ . Las líneas de contorno están separadas 0.5 de modo que las líneas continuas se corresponden con valores enteros (1,2, etc.) y las discontinuas en medios (0.5, 1.5, etc.) A la derecha se puede ver la escala de colores válida para las dos figuras.

En realidad, la forma y fluctuaciones de apareamiento están siendo considerados a la vez, aunque no es posible representarlos bajo la misma figura. Si tenemos en cuenta la información obtenida en las funciones de onda iniciales y finales, (figuras (9.1) (c)-(d)) las cuales dependen de las dos coordenadas y la que nos aporta el panel (b) de la figura (9.2), podemos ver que para la zona de relevancia delimitada por las zonas en las que se encuentra la intensidad de la función de onda, ( $2 < \delta(\delta') < 4$ ) la intensidad del término GT oscila entre un amplio rango de valores (prácticamente entre 0 y 5) lo que indudablemente va a contribuir a definir el valor final del elemento de matriz cuando las fluctuaciones de apareamiento son incluidas.

## 9.4. Resultados para una desintegración $0\nu\beta\beta$

En esta sección discutimos los resultados de los NMEs, y de otros observables, para las 11 desintegraciones doble beta que se han estudiado.

En la tabla 9.1 se muestran los resultados obtenidos para los núcleos que se pueden ver en la columna 1. La parte derecha de la tabla (separada por una doble línea vertical) se corresponde con valores propios de una desintegración  $0\nu\beta\beta$ . Podemos ver los valores de los elementos de matriz cuando sólo se considera la coordenada de la deformación (columna 8) o las dos coordenadas (columna 9). En la columna 10 se expone la variación porcentual que supone sobre el elemento de matriz un cálculo 2D frente a uno 1D. En la columna 11, haciendo uso de la ecuación (9.4), se da la relación entre las semividas cuando el apareamiento se incluye como grado de libertad adicional.

En la parte izquierda de la tabla se recogen valores de observables nucleares relevantes para los estados fundamentales. Su comparación con los valores experimentales (*exp*), situados en una columna justo al lado del valor teórico (*th*), van a permitir comprobar la fiabilidad del método. En las columnas 2 y 3, se da la energía de ligadura en MeV y en las columnas 4 y 5 se dan los valores de la raíz del radio cuadrático medio de carga  $\langle r^2 \rangle^{1/2}$ , sin tener en cuenta el tamaño finito del nucleón [167]. En las columnas 6 y 7 se da el valor de un observable relacionado directamente con una desintegración beta, la intensidad total de Gamow-Teller para los estados iniciales,  $S_-$ , y finales  $S_+$ . Es posible encontrar en la literatura a la intensidad de GT como  $B(GT)$ , en clara analogía a las probabilidades de transición electromagnéticas  $B(E\lambda)$  y  $B(M\lambda)$ . De nuevo, la comparación con los valores experimentales permite evaluar la calidad de la descripción tanto de los estados  $0_1^+$ , como de la desintegración.

La intensidad de GT, calculada con los operadores de GT  $O_{GT}^+$  y  $O_{GT}^-$ , deben satisfacer la regla de suma de Ikeda [65]:

$$\begin{aligned} \hat{S}_- - \hat{S}_+ &= \sum_f |\langle 0_i^+ | O_{GT^-} | 0_f^+ \rangle|^2 - \sum_f |\langle 0_i^+ | O_{GT^+} | 0_f^+ \rangle|^2 = \\ &= \langle 0_i^+ | O_{GT^-}^\dagger O_{GT^-} | 0_i^+ \rangle - \langle 0_i^+ | O_{GT^+}^\dagger O_{GT^+} | 0_i^+ \rangle = 3(\hat{N} - \hat{Z}) \end{aligned} \quad (9.17)$$

Isotope	$(BE)^{th}$	$(BE)^{exp}$	$R^{th}$	$R^{exp}$	$S_{-/+}^{th}$	$S_{-/+}^{exp}$	$M^{0\nu}(\beta_2)$	$M^{0\nu}(\beta, \delta)$	Var (%)	$\frac{T_{1/2}(\beta, \delta)}{T_{1/2}(\beta_2)}$
$^{48}\text{Ca}$	420.919	415.991	3.467	3.473	13.48	$14.4 \pm 2.2$	$2.370_{0.456}^{1.914}$	$2.229_{0.431}^{1.797}$	-6	1.13
$^{48}\text{Ti}$	423.753	418.699	3.560	3.591	1.94	$1.9 \pm 0.5$				
$^{76}\text{Ge}$	664.604	661.598	4.025	4.081	20.96	19.89	$4.601_{0.886}^{3.715}$	$5.551_{1.082}^{4.470}$	21	0.69
$^{76}\text{Se}$	665.268	662.072	4.075	4.139	1.26	$1.45 \pm 0.07$				
$^{82}\text{Se}$	717.034	712.842	4.122	4.139	23.57	21.91	$4.218_{0.837}^{3.381}$	$4.674_{0.931}^{3.743}$	11	0.81
$^{82}\text{Kr}$	718.220	714.273	4.131	4.192	1.26					
$^{96}\text{Zr}$	829.801	828.995	4.298	4.349	27.73		$5.650_{1.032}^{4.618}$	$6.498_{1.202}^{5.296}$	15	0.76
$^{96}\text{Mo}$	834.212	830.778	4.320	4.384	2.64	$0.29 \pm 0.08$				
$^{100}\text{Mo}$	862.003	860.457	4.373	4.445	28.04	26.69	$5.084_{0.935}^{4.149}$	$6.588_{1.227}^{5.361}$	30	0.60
$^{100}\text{Ru}$	865.230	861.927	4.388	4.453	2.63					
$^{116}\text{Cd}$	988.809	987.440	4.567	4.628	34.40	32.70	$4.795_{0.864}^{3.931}$	$5.348_{0.976}^{4.372}$	12	0.80
$^{116}\text{Sn}$	991.390	988.684	4.569	4.626	2.61	$1.09 \pm 0.13$				
$^{124}\text{Sn}$	1051.981	1049.96	4.622	4.675	40.71		$4.808_{0.916}^{3.893}$	$5.787_{1.107}^{4.680}$	20	0.69
$^{124}\text{Te}$	1052.019	1050.69	4.664	4.717	1.63					
$^{128}\text{Te}$	1082.541	1081.44	4.685	4.735	40.48	40.08	$4.107_{1.027}^{3.079}$	$5.687_{1.432}^{4.255}$	38	0.52
$^{128}\text{Xe}$	1081.249	1080.74	4.724	4.775	1.45					
$^{130}\text{Te}$	1097.320	1095.94	4.695	4.742	43.69	45.90	$5.130_{0.989}^{4.141}$	$6.405_{1.244}^{5.161}$	25	0.64
$^{130}\text{Xe}$	1097.655	1096.91	4.733	4.783	1.33					
$^{136}\text{Xe}$	1143.500	1141.88	4.757	4.799	46.77		$4.199_{0.526}^{3.673}$	$4.773_{0.604}^{4.170}$	14	0.77
$^{136}\text{Ba}$	1143.606	1142.77	4.789	4.832	1.06					
$^{150}\text{Nd}$	1234.729	1237.45	5.033	5.041	50.35		$1.707_{0.429}^{1.278}$	$2.190_{0.551}^{1.639}$	29	0.61
$^{150}\text{Sm}$	1236.249	1239.25	4.987	5.040	1.54					

**Tabla 9.1:** Tabla DBD: En las columnas (2-7) se dan los valores teóricos y experimentales para: las energías de ligadura (en MeV) [168]; los radios (en fm) [169], Intensidad de Gamow-Teller  $S_{-/+}$  de los estados iniciales y finales de los candidatos a una desintegración  $0\nu\beta\beta$  [170–174] (los valores teóricos están multiplicados por un factor  $0.74^2$ ). En la columna 8: NMEs tomando como coordenada la fluctuación en la deformación y en la columna 9 simultáneamente fluctuaciones en la deformación y en el apareamiento. Los superíndices dan la contribución del término GT y los subíndices la de Fermi. Las dos últimas columnas dan la variación de los elementos de matriz y las semividas cuando se tiene en cuenta como grado de libertad el apareamiento.

Analizando la tabla, encontramos que para el caso analizado de la desintegración  $^{136}\text{Xe}$ , el elemento de matriz aumenta en un 14 % cuando el apareamiento es incluido como grado de libertad explícito, lo que conlleva una reducción de la semivida en un factor 0.77. Este resultado es consistente con la exploración de regiones con mayores valores de NME que permite el hecho de tener en cuenta el grado de libertad del apareamiento gracias a las fluctuaciones en  $\delta$  que ahora son incluidas en las funciones de onda colectivas. El mismo efecto de aumento de los NMEs se observa para el resto de candidatos.

Con la excepción de la desintegración del  $^{48}\text{Ca}$ , los datos en dos dimensio-

nes de los NMEs nos conducen a una reducción de las predicciones sobre las semividas en factores que van desde 0.81 (para el  $^{82}\text{Se}$ ) hasta 0.52 (para el  $^{128}\text{Te}$ ).

En forma de superíndice y subíndice se da por separado la contribución del término de Gamow-Teller y Fermi respectivamente al valor total del NME. Lo primero que notamos es que el valor de la componente de Fermi es mucho más pequeña que la contribución de Gamow-Teller, siendo por tanto, esta última la dominante. Sin embargo, la ganancia que se obtiene al incluir las fluctuaciones de apareamiento es similar en ambos canales.

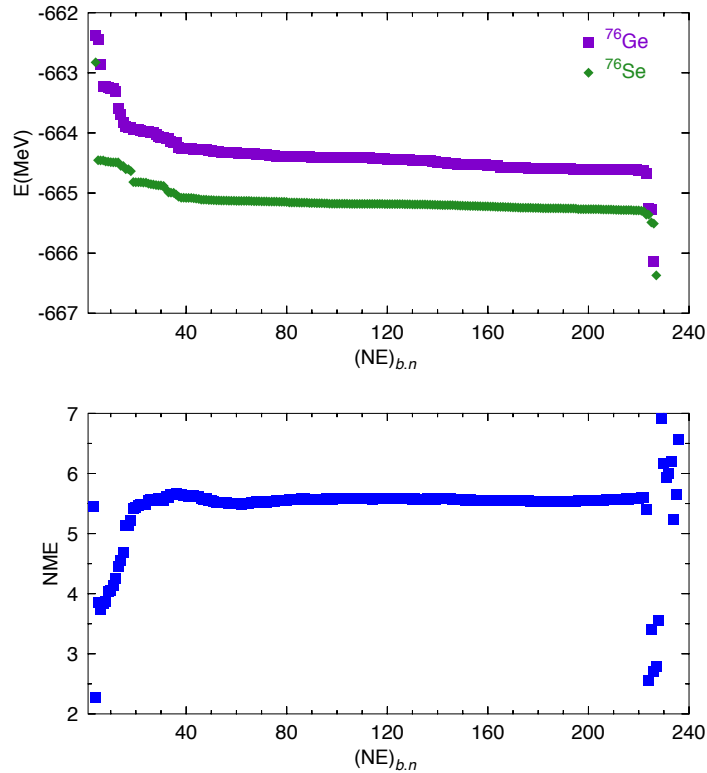
Con respecto al resto de observables nucleares que se muestran en la tabla, se puede apreciar como existe un buen acuerdo entre los datos teóricos cuando son comparados con sus respectivos valores experimentales. Los radios son los valores que mejor se reproducen. Para los valores teóricos de  $S_-$  y  $S_+$  hay que multiplicar por un factor de atenuación  $0.74^2$  [12, 158, 175] para obtener valores cercanos a los experimentales. Este valor tiene en cuenta principalmente efectos de renormalización del operador de Gamow-Teller aunque otros posibles orígenes están actualmente en discusión como el tamaño del espacio de valencia [12] o términos de dos corrientes en el lagrangiano electrodébil [176].

Las energías de ligadura son ligeramente mayores en el caso teórico, si bien esa diferencia no supera los 5 MeV lo que se encuentra dentro de la precisión dada por la interacción de Gogny [177] ya que la interacción está ajustada de modo global a toda la tabla de núcleos.

En relación a la energía, conviene también recordar que la solución numérica a la ecuación de HW, está directamente relacionada con la elección del número de estados naturales de la base. Debe garantizar la independencia lineal de los estados al mismo tiempo que debe incluir las correlaciones dadas por el conjunto original de funciones de onda.

Podemos ver la convergencia de la energía y de los elementos de matriz de la transición en la figura (9.3). Dado que la energía del estado fundamental de los núcleos elegidos como ejemplo,  $^{136}\text{Xe}$  y  $^{136}\text{Ba}$ , están tan próximas entre sí que son casi indistinguibles (-1143.5 MeV y -1143.606 MeV respectivamente), se ha tomado en este caso como ejemplo la desintegración  $^{76}\text{Ge} \rightarrow ^{76}\text{Se}$ . Se observan amplios *plateaus* en los que los valores, tanto para las energías de los estados fundamentales como para los NMEs, se mantienen constantes. Esto se da para todas las transiciones calculadas, de modo que tenemos la garantía de obtener valores estables de los elementos de matriz.

En la figura (9.4) se presentan los resultados para los elementos de matriz nuclear  $0\nu\beta\beta$  calculadas, para los once casos de nuestro estudio, con diferentes



**Figura 9.3:** Figura superior: convergencia de la energía de los estados  $0_1^+$  para el núcleo inicial  $^{76}\text{Ge}$  y final  $^{76}\text{Se}$  como función del número de estados de la base natural. Figura inferior: convergencia de los NMEs.

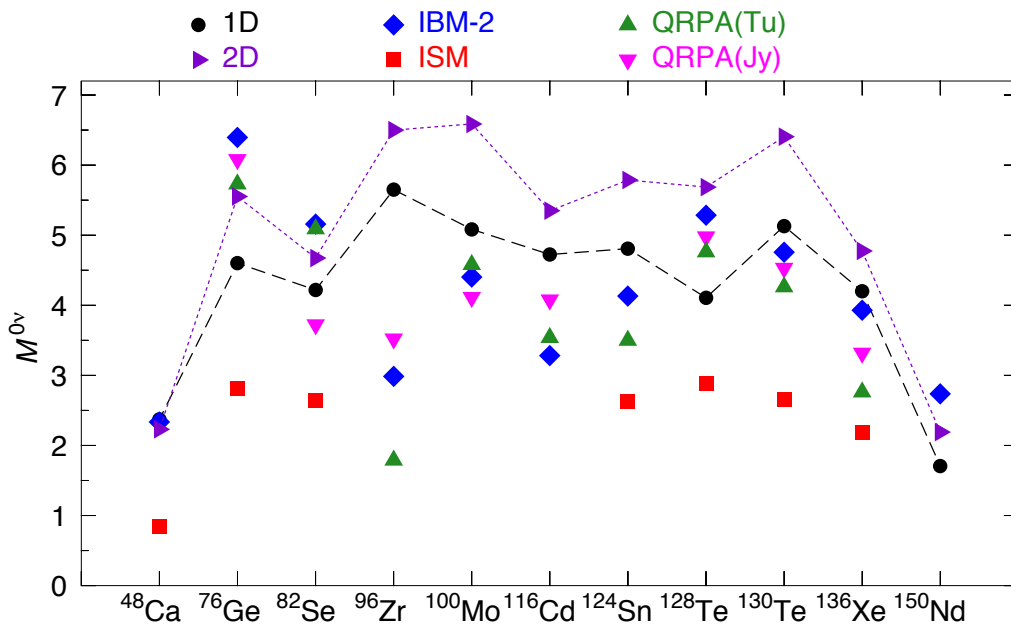
métodos:

- En cuadrados rojos se dan los resultados [153,178] que se obtienen para el modelo de capas (ISM) explicado en la sección 2.2.
- En diamantes azules, se representan los elementos de matriz nuclear [155,156] para el modelo IBM-2 que se trató en la sección 2.5. Estos resultados están multiplicados por un factor 1.18 [158] por la diferencia entre tratar las correlaciones de corto alcance con funciones de onda tipo Jastrow (este caso) o UCOM (todos los demás resultados que se muestran en esta figura)
- En triángulos verdes y rosas tenemos las soluciones para dos tipos de cálculos, QRPA(Jy) [150] y QRPA(Tu) [148], ambos pertenecientes a la familia de la *Quasiparticle random-phase approximation* (QRPA). La



QRPA es un método basado en la aproximación de HF más apareamiento BCS en el que se incluyen correlaciones tipo RPA.

- Los valores de nuestros cálculos en aproximación PN-VAP+PNAMP con el métodos GCM para el caso 1D [158] y 2D [29] se pueden ver en círculos negros y triángulos morados respectivamente, ambos unidos por una línea discontinua de puntos. Se corresponden con los valores de las columnas 8 y 9 de la tabla (9.1).



**Figura 9.4:** Elementos de matriz nucleares calculados utilizando diferentes métodos mostrados en la leyenda (ver texto principal para más información). Nuestros resultados para la aproximación PN-VAP+PNAMP, que se corresponden con los datos de la tabla (9.1), se pueden ver en triángulos unidos por una línea de puntos.

Si comparamos los valores de los NMEs que se obtienen con nuestro método en 1D y 2D observamos que ambos muestran el mismo patrón de comportamiento, sin embargo los valores de los NMEs aumentan entre un 10 % y un 40 % cuando se incluye como grados de libertad, la deformación y el apareamiento frente al caso en el que solo el primero es considerado. Esta diferencia en el incremento experimentado está relacionada con la distribución de las funciones de onda; aquellas que tengan una distribución desplazada a valores mayores de  $\delta$  van a poder encontrar valores más altos para los NMEs al explorar este grado de libertad ya que como se ha visto, estos elementos

de matriz dependen fuertemente del apareamiento y muestran valores apreciables por encima de  $\delta = 3$ .

Encontramos para el elemento de matriz un valor medio de 5.07 aunque hay dos casos especiales; la desintegración del  $^{48}\text{Ca}$  y la del  $^{150}\text{Nd}$ . En ellos, su elemento de matriz correspondiente está bastante por debajo del valor medio. El  $^{48}\text{Ca}$  es un caso particular pues es un núcleo doblemente mágico, ya que lo es en protones ( $Z=20$ ) y en neutrones ( $N=28$ ). Por este motivo, la función de onda de este estado inicial se encuentra considerablemente desplazada a zonas con apareamiento más bajo, lo que hace que se obtenga en esta caso un valor para el NME ligeramente menor. Además la posibilidad de explorar la dirección  $\delta$  en un núcleo con doble capa cerrada no aporta ninguna mejora. La desintegración del  $^{150}\text{Nd}$  también presenta un valor mucho menor que el resto. Las funciones de onda de los estados implicados en la desintegración, presentan mínimos bien deformados prolates pero las deformaciones a las que se encuentran son bastante diferentes ( $\beta=0.35$  para el estado inicial y  $\beta=0.20$  para el estado final), siendo este argumento una de las principales fuentes de supresión del NME [158]. Sin embargo, en este caso, la exploración de la coordenada  $\delta$  aporta al valor final del NME un aumento del 29 %.

Si comparamos los resultados con los obtenidos por otros métodos vemos que los nuevos valores con dos coordenadas se acercan más a los resultados QRPA/IBM para los casos  $^{48}\text{Ca}$   $^{76}\text{Ge}$   $^{128}\text{Te}$  y  $^{150}\text{Nd}$ , mientras que son mayores para los otros candidatos, ver figura (9.4). No obstante, ni los cálculos QRPA ni los IBM incluyen de forma explícita las fluctuaciones de apareamiento.

Las principales diferencias entre nuestra aproximación y la QRPA son: las interacciones nucleares son también diferentes en ambos casos; se asume simetría esférica en la QRPA; en el caso GCM (1D y 2D) se tiene una base de partícula independiente mayor que no consta de *core* y la ausencia de excitaciones de cuasipartícula.

Todas estas diferencias metodológicas y en las interacciones usadas hace bastante complicado identificar el origen de las discrepancias/similitudes encontradas en los NME.

Por otro lado, los cálculos del modelo ISM, presentan valores que están bastante distanciados de las otras aproximaciones, especialmente para la mayoría de nuestros resultados, hacia valores inferiores. Ambos métodos, ISM y GCM, han sido recientemente comparados en la referencia [179] con el objetivo de esclarecer las diferencias entre ambos métodos cuando se calculan los NMEs. Las correlaciones en las funciones de onda introducidas más allá de la aproximación esférica en el GCM y 'senioridad' cero en el SM tienden a reducir el elemento de matriz. Aunque el comportamiento cualitativo de los NME es

similar en ambos casos, los NME calculados con el GCM son un aproximadamente factor 2 mayores que los SM. El origen de esta discrepancia puede ser la falta de componentes de senioridad alta en el método GCM inherente a la ausencia de excitaciones explícitas de cuasipartículas en las funciones de onda. Por otra parte, la proyección a buen isospín (en el marco del SM) tiene un efecto grande en el término de Fermi pero no así en el de GT. Este resultado nos induce a pensar que el aumento en los NME obtenido al introducir el grado de libertad de apareamiento no se debe a una mayor violación de isospín ya que, como se aprecia en la tabla 9.1, tanto la componente de Fermi como la GT aumentan de manera similar.

## 9.5. Resumen

En resumen, en este capítulo se han presentado los elementos de matriz  $0\nu\beta\beta$  para cálculos GCM en aproximación PN-VAP+PNAMP, con la interacción de Gogny e incluyendo por primera vez el apareamiento como grado de libertad, además de la deformación cuadrupolar axial, obteniendo las siguientes conclusiones:

- Los elementos de matriz son mayores cuando la transición se hace entre estados con deformación similar.
- Para estados débilmente correlacionados, deltas menores de dos, los elementos de matriz son prácticamente cero.
- Si aumentan las correlaciones de apareamiento los elementos de matriz se hacen mayores.
- Cuando estudiamos la dependencia de los NMEs con las fluctuaciones de apareamiento, encontramos una amplia zona alrededor de la diagonal, delimitada por las rectas:  $\delta' = \delta \pm 3$  y  $\delta + \delta' = 3$  donde los elementos de matriz toman valores considerables. Esto, unido al hecho de permitir fluctuaciones de apareamiento, hace que se obtengan valores para los elementos de matriz considerablemente más altos, entre un 10 %-40 %, que cuando solo se tiene en cuenta la deformación. El hecho de que estos valores sean superiores implica que las semividas de los candidatos se van a ver reducidas, lo que nos sitúa en mejor escenario para que desintegraciones  $0\nu\beta\beta$  puedan ser detectadas experimentalmente.
- Para una descripción más completa de los NME podría ser interesante considerar componentes de senioridad altas incluyendo excitaciones de cuasipartícula, así como la proyección a isospín.



# Capítulo 10

## Conclusiones y perspectivas

En este trabajo se han utilizado diferentes métodos de resolución de problemas de muchos cuerpos cuánticos aplicados al estudio de los núcleos atómicos. El punto de partida ha sido el método de HFB, con el que se ha obtenido un conjunto de funciones de onda intrínsecas que posteriormente han sido proyectadas a buen número de partículas y/o buen momento angular. Por último, hemos completado la descripción utilizando el método GCM permitiendo la mezcla de configuraciones e introduciendo correlaciones dinámicas. En esta memoria se han detallado los principales aspectos del método, se han analizado aspectos formales de la teoría y se han presentado los resultados obtenidos tras aplicar el método al estudio de sistemas físicos.

Por primera vez se han considerado de manera simultánea fluctuaciones cuadrupolares y de apareamiento en el marco de teorías más allá del campo medio con interacciones efectivas. A lo largo de esta memoria se muestran e implementan diferentes métodos hasta obtener una función de onda lo más completa posible utilizando los dos grados de libertad relevantes. Principalmente se han discutido tres: HFB+AMP, HFB+PNAMP y PN-VAP+PNAMP.

Se ha concluido que el método GCM con funciones de onda intrínsecas PN-VAP proyectadas simultáneamente a buen momento angular y buen número de partículas (PNAMP), tomando los mencionados dos grados de libertad, es el que ofrece una mejor descripción del sistema y proporciona unos resultados más consistentes y aproximados a la energía exacta del sistema cuando se compara con los datos experimentales. Además, tiene las ventajas de que el espacio de configuración en el que se trabaja es grande y la interacción usada es “universal”, en el sentido de que se puede utilizar para todos los núcleos de la tabla.

Se han analizado los resultados obtenidos para varios observables nucleares: probabilidades de transición, energías de separación, se han discutido las

superficies de energía equipotenciales y, con especial detalle, los espectros de excitación para diversos núcleos como función de las dos coordenadas consideradas y en base a tres diferentes aproximaciones. Se ha seleccionado: la cadena isotópica del Magnesio ( $N = 24 - 34$ ), tres núcleos (Cromo, Titanio y Calcio) con  $N = 30$  y tres isótopos del Calcio con  $Z = 20$ . Esto nos ha permitido, aparte de conocer su estructura nuclear, discutir las diferencias que se dan según la técnica usada y las dimensiones empleadas (una o dos). Se ha aplicado el método para investigar la cuestión de los posibles cierres de capa en  $N = 32$  y  $N = 34$  en los isótopos del Calcio, calculando las energías de excitación del estado  $2^+$ . Se ha observado un buen acuerdo entre los datos teóricos y experimentales de los que se disponen hasta el momento.

Se ha visto que los efectos de las fluctuaciones de apareamiento aumentan con la energía de excitación y con momento angular mayor y que los valores teóricos, en general, bajan cuando se incluye  $\delta$ , lo que hace que se aproximen más a los datos experimentales.

La aproximación HFB+AMP ha sido estudiada en detalle, ya que los espectros obtenidos dentro de esta aproximación son diferentes a los que dan los otros dos métodos: tienen un aspecto muy comprimido que es poco razonable. Para ello, se ha estudiado la distribución del número medio de partículas y los elementos de matriz de la norma, dentro de esta aproximación, mostrando que este método ofrece resultados de poca calidad. Se encuentra una mayor dependencia lineal, por lo que tenemos un espacio variacional menor y una mayor mezcla, no deseada, de los estados.

También se han discutido las funciones de onda que se obtienen con las diferentes aproximaciones. En especial, para el caso sin proyección al número de partículas, se observa una concentración de la intensidad de la función de onda 2D no realista, que sumado al efecto de la dependencia lineal mencionada más arriba, son la causa de que se obtengan unos espectros mucho más comprimidos que los que se obtienen para el caso en el que hay proyección al número de partículas.

Se ha llegado a la conclusión de que la proyección al número de partículas es un ingrediente esencial. También se obtiene una fuerte dependencia con la manera en la que es generada la base intrínseca. Es importante implementar la proyección al número de partículas de manera autoconsistente, esto es, en una variación después de la proyección (VAP).

Se ha discutido la existencia de las vibraciones puras de apareamiento. Se observan cuando solo se tiene en cuenta la coordenada  $\delta$ , pero cuando se acopla la deformación cuadrupolar, se encuentra que este grado de libertad es dominante, inhibiendo la presencia de vibraciones de apareamiento genuinas.

Por último, se han presentado los elementos de matriz nuclear para una desintegración doble beta sin emisión de neutrinos para 11 posibles candidatos.

Por un lado, los núcleos implicados en las desintegraciones representan otros casos particulares diferentes a los núcleos que se habían analizado hasta este punto, lo que ha supuesto extender los cálculos de las fluctuaciones de apareamiento a casos de núcleos más pesados, esféricos o muy deformados. Para ello, el espacio de configuración ha tenido que ser ampliado (de 8 capas mayores de oscilador a 11).

Por otro lado, en lo que a los NMEs se refiere, podemos decir que:

- a) Hemos confirmado que esta desintegración está favorecida si se da entre estados con deformación muy similar siendo el caso esférico el preferido.
- b) El apareamiento juega un papel importante y que estos elementos de matriz toman valores mayores si las correlaciones de apareamiento se hacen mayores.
- c) Si se tiene en cuenta la coordenada  $\delta$  el valor de dichos elementos de matriz experimenta un aumento significativo de su valor, de media 5.07, y que oscila entre el 10 % para el menor y un 40 % para el mayor con la correspondiente disminución de la vida media asociada.

Como se ha ido desgranando a lo largo de esta memoria, el método implementado, cuando se incluye  $\delta$ , ofrece unos resultados teóricos que, en general, disminuyen los valores con respecto a lo obtenido cuando sólo se considera el grado de libertad de la deformación, mejorando el acuerdo con los datos experimentales. Aun así, los valores que se obtienen de forma teórica se encuentran sobreestimados. Para conseguir un mejor acuerdo cuantitativo es posible introducir mejoras y ampliar nuestros cálculos. Además, este trabajo deja varias líneas abiertas, algunas de ellas ya mencionadas, que seguir explorando. Se pueden abordar como perspectivas futuras de trabajo las siguientes cuestiones:

- Seguir la línea de este trabajo y extender estos cálculos, con dos grados de libertad, para describir otros observables en cualquier otra zona de la tabla de núcleos que sean de interés, dada la universalidad del método.
- Extender estos cálculos a un caso en 3D, construyendo por separado en protones y neutrones, lo que permitiría estudiar características específicas que sean genuinas de protones o neutrones.
- Introducir progresivamente y por orden de importancia grados de libertad extra en el sistema, como deformaciones de orden mayor. Es

importante hacer esta incorporación por orden de mayor a menor relevancia en la contribución que van a dar a la energía. Valga como ejemplo el estudio del método HFB+AMP incluyendo la fluctuación del número de partículas. De nada sirve estudiar las superficies de energía potencial en función de la deformación cuadrupolar y de la fluctuación del número de partículas si no es restaurado el propio número de partículas. Si queremos afinar el método, tenemos que tener en cuenta, en primer lugar, los aspectos más relevantes que van a modificar en mayor medida el valor de los observables, como es para el caso citado, la proyección a  $N$  frente a las fluctuaciones.

- Extender el estudio de los dos grados de libertad a una base triaxial.
- Permitir la ruptura de otras simetrías, como por ejemplo la ruptura de la simetría de inversión temporal. Esto implicaría tener un espacio variacional más grande y funciones de onda de *Cranking*, lo que implicaría una mejor descripción para los estados con momento angular distinto de cero y una mejora en los momentos de inercia. La ruptura de la tercera componente de isospín permitiría incluir en apareamiento protón- neutrón. Una ruptura de la simetría bajo paridad, permitiría describir estados de paridad negativa, así como explorar el grado de libertad octupolar.
- Sería deseable para el caso de la desintegración doble beta, restaurar la simetría de isospín.
- Incorporar de forma explícita estados de más cuasipartículas y excitaciones de cuasipartículas.
- Realizar una variación después de la proyección para el número de partículas y para cada valor del momento angular (PNAMP-VAP) para encontrar las funciones de onda intrínsecas de tipo producto. De esta forma, obtendríamos los valores correctos de los momentos de inercia.
- La interacción fenomenológica efectiva que ha sido utilizada también puede ser mejorada, bien introduciendo nuevos términos o modificando otros, así como con nuevas parametrizaciones de la interacción que sean más completas y, por ejemplo, tengan en cuenta efectos más allá del campo medio.

Pese a que estas ideas para perfeccionar el método podrían suponer una mejora cuantitativa con respecto a los datos experimentales, no esperamos cambios cualitativos en las principales conclusiones que han sido discutidas en esta memoria.



# Apéndice A

## Acrónimos

Como guía para el lector, hemos agrupado en este apéndice los acrónimos más relevantes por orden de aparición en el texto.

**HF** Hartree Fock

**HFB** Hartree Fock Bogoliubov

**ISM** Modelo de capas

**SCMF** Campo medio autoconsistente

**MF** Campo medio

**BMF** Métodos más allá del campo medio

**SCCM** Conservación de las simetrías y mezcla de configuraciones

**GCM** Método de la coordenada generadora

**RMF** Campo medio relativista

**QCD** Cromodinámica cuántica

**IBM** Modelo de Bosones Interactuantes.

**BCS** Bardeen Cooper Schrieffer

**PAV** Proyección después de la variación

**VAP** Variación después de la proyección

**PN-VAP** Particle Number Variation After Projection

**PNP** Proyección a buen número de partículas

**AMP** Proyección a momento angular

**PNAMP** Proyección a momento angular y buen número de partículas

**HW** Ecuación de Hill-Wheeler

**PES** Superficies de energía potencial

**PN** Proyección al número de partículas

**RVAP** Variación después de la proyección restringido

$2\nu\beta\beta$  Desintegración doble beta con dos neutrinos

$0\nu\beta\beta$  Desintegración doble beta sin emisión de neutrinos

**NME** Elementos de matriz nuclear

**DBD** Desintegración doble beta

**F** Fermi

**GT** Gamow-Teller

**QRPA** *Quasiparticle random phase approximation*

**EDF** Funcionales de la densidad de energía

**SRC** Correlaciones de corto alcance

**UCOM** *Unitary correlation operator method*

# Apéndice B

## Teorema de Wick y contracción de operadores

Varias de las expresiones derivadas en el capítulo 3 hacen uso del teorema de Wick que nos permite calcular valores esperados de un producto de operadores de creación y destrucción. En este apéndice se detalla dicho teorema. Los operadores de quasipartículas deben estar en el producto en el *orden normal*, esto es, los de creación a la izquierda y los de destrucción a la derecha. Por cada número de permutaciones impares que deban realizarse para poner los operadores en esta disposición aparecerá un signo menos. Por otro lado, se define las contracciones de dos operadores de creación o destrucción ( $ab$ ) entre estados  $|\Phi\rangle$ , que son el vacío de los operadores de quasipartículas, como:

$$\widehat{ab} = \frac{\langle \Phi | ab | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} \quad (\text{B.1})$$

El teorema de Wick se aplica para expresar el producto de operadores de creación y destrucción en cualquier representación y en cualquier orden como la suma del producto en orden normal de dichos operadores en la base de quasipartículas más la suma del producto en orden normal con una contracción tomada de todas las maneras posibles más la suma del producto en orden normal tomando dos contracciones de todas las formas posibles y así sucesivamente.

Teniendo en cuenta las relaciones de anticonmutación y las transformaciones tipo HFB dadas en el capítulo 3 y considerando el caso más sencillo, cuando los estados entre los que se va a evaluar los valores esperados se correspondan con el mismo vacío de quasipartículas,  $|\Phi\rangle$ . Se obtienen las siguientes expresiones si son aplicamos sobre estados en la base de partículas y quasipartículas:

$$\widehat{\beta_k \beta_{k'}} = \widehat{\beta_k^\dagger \beta_{k'}} = \widehat{\beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger} = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$\widehat{\beta_k \beta_{k'}^\dagger} = \frac{\langle \Phi | \beta_k \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \delta_{kk'} \quad (\text{B.3})$$

$$\widehat{\beta_k c_{k'}} = \frac{\langle \Phi | \beta_k c_{k'} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = V_{k'k}^* \quad (\text{B.4})$$

$$\widehat{\beta_k c_{k'}^\dagger} = \frac{\langle \Phi | \beta_k c_{k'}^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = U_{k'k}^* \quad (\text{B.5})$$

La matriz densidad vendrá definida como:

$$\begin{aligned} \widehat{c_k^\dagger c_l} &= \sum_{k'l'} \frac{\langle \Phi | (V_{kk'} \beta_{k'} + U_{kk'}^* \beta_{k'}^\dagger) (V_{ll'} \beta_{l'} + U_{ll'}^* \beta_{l'}^\dagger) | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \\ &= \sum_{kl} V_{kk'} V_{ll'}^* \frac{\langle \Phi | \beta_{k'} \beta_{l'}^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \sum_{kl} V_{kk'} V_{ll'}^* \delta_{k'l'} = (V^* V^T)_{lk} \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Y el tensor de apareamiento:

$$\begin{aligned} \widehat{c_k c_l} &= \sum_{k'l'} \frac{\langle \Phi | (U_{kk'} \beta_{k'} + V_{kk'}^* \beta_{k'}^\dagger) (U_{ll'} \beta_{l'} + V_{ll'}^* \beta_{l'}^\dagger) | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \\ &= \sum_{k'l'} U_{kk'} V_{ll'}^* \frac{\langle \Phi | \beta_{k'} \beta_{l'}^\dagger | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \sum_{kl} U_{kk'} V_{ll'}^* \delta_{k'l'} = (V^* U^T)_{lk} \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Si se considera la proyección al número de partículas, los solapes que queremos calcular se dan entre estados que no se corresponden con el mismo vacío de cuasipartículas, de modo que las expresiones anteriores obtenidas con el teorema de Wick deben ser generalizadas [180]. Tomamos la parametrización de Thouless entre dos estados que son vacíos de cuasipartículas diferentes,  $|\Phi\rangle$  y  $|\bar{\Phi}\rangle$  [58, 66] :

$$|\bar{\Phi}\rangle = \langle \Phi | \bar{\Phi} \rangle \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger \right) |\Phi\rangle \quad (\text{B.8})$$

$$\begin{aligned}
[\beta_m \beta_l] &= \frac{\langle \Phi | \beta_m \beta_l | \bar{\Phi} \rangle}{\langle \Phi | \bar{\Phi} \rangle} = \sum_{kk'} \langle \Phi | \beta_m \beta_l \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger \right) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{kk'} \frac{1}{2} A_{kk'}(\varphi) \langle \Phi | \beta_m \beta_l \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle = \sum_{kk'} \frac{1}{2} A_{kk'}(\varphi) (\delta_{kl} \delta_{k'm} - \delta_{km} \delta_{k'l}) = \\
&= A_{ml}(\varphi) \tag{B.9}
\end{aligned}$$

Esta matriz  $A_{ml}(\varphi)$  es antisimétrica. En función de esta matriz se definen las siguientes matrices:

$$\bar{U}(\varphi) = U^* + VA(\varphi) \tag{B.10}$$

$$\bar{V}(\varphi) = V^* + UA(\varphi) \tag{B.11}$$

Si continuamos con las contracciones para estados de partículas, se obtiene:

$$\begin{aligned}
[c_m^\dagger c_l] &= \rho_{lm}(\varphi) = \frac{\langle \Phi | c_m^\dagger c_l | \bar{\Phi} \rangle}{\langle \Phi | \bar{\Phi} \rangle} = \\
&= \langle \Phi | c_m^\dagger c_l \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger \right) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{m'l'} \langle \Phi | (V_{mm'} \beta_{m'} + U_{mm'}^* \beta_{m'}^\dagger) (U_{l'l'} \beta_{l'} + V_{l'l'}^* \beta_{l'}^\dagger) \cdot \\
&\quad \cdot (I + \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger + \dots) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{m'l'} V_{mm'} V_{l'l'}^* \delta_{m'l'} \frac{1}{2} \sum_{kk'm'l'} A_{kk'}(\varphi) V_{mm'} U_{l'l'} \langle \Phi | \beta_{m'} \beta_{l'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle = \\
&= (V^* V^T)_{lm} + (UA(\varphi) V^T)_{lm} = (\bar{V}(\varphi) V^T)_{lm} \tag{B.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[c_m c_l] &= \kappa_{lm}^{10}(\varphi) = \frac{\langle \Phi | c_m c_l | \bar{\Phi} \rangle}{\langle \Phi | \bar{\Phi} \rangle} = \\
&= \langle \Phi | c_m c_l \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger \right) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{m'l'} \langle \Phi | (U_{mm'} \beta_{m'} + V_{mm'}^* \beta_{m'}^\dagger) (U_{l'l} \beta_{l'} + V_{l'l}^* \beta_{l'}^\dagger) \cdot (I + \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger + \dots) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{m'l'} U_{mm'} V_{l'l}^* \delta_{m'l'} + \frac{1}{2} \sum_{kk'm'l'} A_{kk'}(\varphi) U_{mm'} U_{l'l} \langle \Phi | \beta_{m'} \beta_{l'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle = \\
&= (V^* U^T)_{lm} + (U A(\varphi) U^T)_{lm} = (\bar{V}(\varphi) U^T)_{lm} \quad (\text{B.13})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[c_m^\dagger c_l^\dagger] &= \kappa_{ml}^{01}(\varphi) \frac{\langle \Phi | c_m^\dagger c_l^\dagger | \bar{\Phi} \rangle}{\langle \Phi | \bar{\Phi} \rangle} = \\
&= \langle \Phi | c_m^\dagger c_l^\dagger \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger \right) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{m'l'} \langle \Phi | (V_{mm'} \beta_{m'} + U_{mm'}^* \beta_{m'}^\dagger) (V_{l'l} \beta_{l'} + U_{l'l}^* \beta_{l'}^\dagger) \cdot (I + \frac{1}{2} \sum_{kk'} A_{kk'}(\varphi) \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger + \dots) | \Phi \rangle = \\
&= \sum_{m'l'} V_{mm'} U_{l'l}^* \delta_{m'l'} + \frac{1}{2} \sum_{kk'm'l'} A_{kk'}(\varphi) V_{mm'} V_{l'l} \langle \Phi | \beta_{m'} \beta_{l'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger | \Phi \rangle = \\
&= (V U^\dagger)_{ml} - (V A(\varphi) V^T)_{ml} = -(U^* V^T)_{ml} - (V A(\varphi) V^T)_{ml} = \\
&= -(\bar{U}(\varphi) V^T)_{lm} \quad (\text{B.14})
\end{aligned}$$

# Apéndice C

## Expresiones de la energía proyectada

En este apéndice se dan las expresiones para la energía proyectada, según el tipo de proyección implementada, las simetrías que son restauradas y el número de variables que han sido tenidas en cuenta, según se ha explicado en el capítulo 3. Para ello, se hacen uso de las propiedades de los operadores descritos en el mismo capítulo.

Diferenciamos dos grandes bloques, según haya sido calculada la función de onda intrínseca, por el método de HFB (3.47) o por el método VAP (3.50) cuando el proyector es el del número de partículas (PN). Posteriormente diferenciamos la proyección después de la variación que ha sido realizada y por último se indica si se toman uno; 1D ( $q$ ) o dos; 2D ( $q, \delta$ ) grados de libertad

- El método PAV proyectando sólo a momento angular (*Angular momentum projection*, AMP) o sólo a buen número de partículas (*particle number projection*, PNP) a partir de funciones de onda tipo HFB obtenidas de resolver las ecuaciones correspondientes (3.40, 3.41) con una o dos ligaduras al mismo tiempo (aparte de las del número de protones y neutrones, siempre incluidas en ese tipo de cálculos).

★ HFB+PNP 1D

$$E_{1D}^{NZ}(q) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q) | P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q) \rangle} \quad (\text{C.1})$$

★ HFB+PNP 2D

$$E_{2D}^{NZ}(q, \delta) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) | P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) \rangle} \quad (\text{C.2})$$

★ HFB+AMP 1D

$$E_{1D}^J(q) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} | \Phi_{\text{HFB}}(q) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} | \Phi_{\text{HFB}}(q) \rangle} \quad (\text{C.3})$$

★ HFB+AMP 2D

$$E_{2D}^J(q, \delta) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} | \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} | \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) \rangle} \quad (\text{C.4})$$

El método PAV proyectando simultáneamente al momento angular y al número de partículas (*Particle number angular momentum projection*, PNAMP) a partir de funciones de onda de HFB.

★ HFB+PNAMP 1D

$$E_{1D}^{NZJ}(q) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q) \rangle} \quad (\text{C.5})$$

★ HFB+PNAMP 2D

$$E_{2D}^{NZJ}(q, \delta) = \frac{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) \rangle}{\langle \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) | (P^{JM})^\dagger P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{HFB}}(q, \delta) \rangle} \quad (\text{C.6})$$

- El método VAP. En este caso, construiremos superficies de energía potencial proyectadas a buen número de partículas obtenidas a partir de funciones intrínsecas PN-VAP, solución de la ecuación (3.50), con las mismas ligadura que para el caso de HFB.

★ PN-VAP 1D

$$E_{1D}^{NZ}(q) = \frac{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q) \rangle}{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q) | P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q) \rangle} \quad (\text{C.7})$$

★ PN-VAP 2D

$$E_{2D}^{NZ}(q, \delta) = \frac{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) | \hat{H} P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) \rangle}{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) | P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) \rangle} \quad (\text{C.8})$$



El método PN-VAP más PAV proyectando a buen momento angular.

★ PN-VAP+PNAMP 1D

$$E_{1D}^{NZJM}(q) = \frac{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q) \rangle}{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q) | (P^{JM})^\dagger | P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q) \rangle} \quad (\text{C.9})$$

★ PN-VAP+PNAMP 2D

$$E_{2D}^{NZJM}(q, \delta) = \frac{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) | (P^{JM})^\dagger \hat{H} P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) \rangle}{\langle \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) | P^{JM} P^N P^Z | \Phi_{\text{VAP}}(q, \delta) \rangle} \quad (\text{C.10})$$

Los desarrollos para el numerador y denominador se analizan con detalle, para el caso particular más general, en el siguiente apéndice.



# Apéndice D

## Cálculos con funciones de onda proyectadas

En este apéndice se mostrará el cálculo de valores esperados entre estados GCM con proyección simultánea al número de partículas y al momento angular. Este es el caso más general posible de todos los tratados. Estas expresiones se simplificarán de la siguiente manera:

- a) Si no se hace el generado de coordenadas  $\rightarrow q = q'$
- b) Si no se hace proyección al número de partículas  $\rightarrow \varphi = 0$
- c) Si no se hace la proyección al momento angular  $\rightarrow \beta = 0$

En el capítulo 3 se definió el elemento de matriz entre estados de la base natural, ecuación (3.143) como:

$$\langle k^{NZJ_1} | \hat{O} | k'^{NZJ_2} \rangle = \int (u_k^{NZJ_1}(\vec{q}))^* \langle \Phi^{NZJ_1}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{NZJ_2}(\vec{q}') \rangle u_{k'}^{NZJ_2}(\vec{q}') \frac{d\vec{q} d\vec{q}'}{\sqrt{n_k^{NZJ_1} n_{k'}^{NZJ_2}}} \quad (\text{D.1})$$

De modo que hay que calcular el solape que aparece:

$$\langle \Phi^{NZJ}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{NZJ'}(\vec{q}') \rangle \quad (\text{D.2})$$

Si tomamos la definición del proyector a buen número de partículas y sus propiedades explicados en la sección 3.4.1 y lo mismo para el proyector al momento angular descrito en la sección 3.4.2 y los sustituimos en la expresión del solape (D.2) obtenemos:

$$\langle \Phi^{NZJ_1}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{NZJ_2}(\vec{q}') \rangle = \sum_{K_1 K_2} (a_{K_1}^{J_1}(\vec{q}))^* a_{K_2}^{J_2}(\vec{q}') \langle \Phi(\vec{q}) | (P_{M_1 K_1}^{J_1})^\dagger \hat{O} P_{M_2 K_2}^{J_2} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}') \rangle \quad (\text{D.3})$$

Estas expresiones van a ser válidas si el operador  $\hat{O}$  conmuta con el operador de rotaciones y con los operadores del número de partículas.

$$\begin{aligned} & \langle \Phi^{NZJ_1}(\vec{q}) | \hat{O} | \Phi^{NZJ_2}(\vec{q}') \rangle = \\ & = \sum_{K_1 K_2} (a_{K_1}^{J_1}(\vec{q}))^* a_{K_2}^{J_2}(\vec{q}') \frac{2J+1}{8\pi^2} \int D_{K_1 K_2}^{J*}(\Omega) \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} \hat{R}(\Omega) P^N P^Z | \Phi(\vec{q}') \rangle d\Omega, \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

donde:

- $\Omega = (\alpha, \beta, \gamma)$  son los ángulos de Euler.
- $\hat{R}(\Omega)$  es el operador de rotaciones.
- $D_{MK}^{J*}(\Omega)$  son las funciones de Wigner.

Si tomamos las definiciones siguientes:

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\alpha\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_y} e^{-i\gamma\hat{J}_z}, \quad (\text{D.5})$$

$$e^{-i\beta\hat{J}_y} = e^{i\frac{\pi}{2}\hat{J}_x} e^{-i\beta\hat{J}_x} e^{-i\frac{\pi}{2}\hat{J}_z}, \quad (\text{D.6})$$

$$D_{MK}^{J*}(\Omega) = e^{i\alpha M} e^{i\gamma K} d_{MK}^{J*}(\beta), \quad (\text{D.7})$$

$$\int d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi \text{sen}\beta d\beta \int_0^{2\pi} d\gamma, \quad (\text{D.8})$$

y las aplicamos a la ecuación (D.4) el solape a calcular toma la forma:

$$\begin{aligned} & \sum_{K_1 K_2} (a_{K_1}^{J_1}(\vec{q}))^* a_{K_2}^{J_2}(\vec{q}') \frac{2J+1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K_1} e^{i\gamma K_2} d_{K_1 K_2}^{J*} \\ & \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} e^{-i\alpha\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_y} e^{-i\gamma\hat{J}_z} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}') \rangle d\alpha \text{sen}\beta d\beta d\gamma \end{aligned} \quad (\text{D.9})$$

Aplicamos la definición (D.6), imponemos simetría axial, de paridad y de simplex a la expresión anterior:

$$\frac{2J+1}{8\pi^2} \cdot 2\pi \cdot 2\pi \int_0^\pi d_{00}^{J*} \langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} e^{-i\beta\hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}') \rangle \text{sen}\beta d\beta \quad (\text{D.10})$$

A continuación, para calcular las expresiones de la norma y la energía, utilizamos la definición de los proyectores del número de partículas (3.62) para protones y neutrones por separado, ya que las funciones de onda tipo HFB no mezclan isospín, para calcular el solape que aparece en la integral:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}') \rangle = \frac{1}{L^2} \sum_{l_Z} \sum_{l_N} e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | \hat{O} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}') \rangle} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}') \rangle \quad (\text{D.11})$$

Primero, es necesario calcular la norma, definida como:

$$n^{NZ}(\vec{q}, \vec{q}', \beta) = \langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} P^N P^Z | \Phi(\vec{q}') \rangle \quad (\text{D.12})$$

La norma puede ser factorizada en una parte correspondiente de protones y en otra de neutrones. Si tomamos como ejemplo la de neutrones y aplicamos la definición del proyector correspondiente (3.62) obtenemos:

$$n^N(\vec{q}, \vec{q}', \beta) = \frac{1}{L} \sum_{l_N} e^{-i\varphi_{l_N} N} \langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi(\vec{q}') \rangle \quad (\text{D.13})$$

Lo mismo se va a obtener para la norma de protones, de modo que la norma será:

$$n^{NZ}(\vec{q}, \vec{q}') = n^N(\vec{q}, \vec{q}') n^Z(\vec{q}, \vec{q}'). \quad (\text{D.14})$$

El elemento de matriz que aparece en el sumatorio se calcula utilizando la fórmula de Onishi [75]:

$$\langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi(\vec{q}') \rangle = (e^{i[\beta \text{Tr}(J_x) - \varphi \text{Tr}(1)]} \text{Det}[T_{22}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_N})])^{(1/2)}, \quad (\text{D.15})$$

donde la matriz  $T_{22}$ , (ecuación (3.72)) es una de las matrices que componen la matriz  $\mathcal{T}$  [58]. Ésta matriz de dimensión  $2N \times 2N$ , permite una transformación lineal unitaria que relaciona los operadores de cuasipartículas de dos vacíos diferentes que conservan las relaciones de conmutación.

En la ecuación anterior vemos que hay un signo indeterminado debido a la raíz cuadrada. Existen distintos métodos generales para determinar este signo, como el método de Neergard [181]. Sin embargo, como estamos trabajando en el caso axial, es posible utilizar las simetrías internas de las funciones de onda tipo producto para determinar este signo de manera unívoca.

Segundo, necesitaremos calcular los elementos de matriz del operador  $\hat{O}$ . En concreto cuando éste sea el hamiltoniano, ecuación (3.16):

$$\hat{H} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} c_{l_1}^\dagger c_{l_2} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3}$$

Este operador nos va a dar la expresión de la energía:  $e^{NZ}(\vec{q}, \vec{q}', \beta)$ , como suma de un término cinético más otro potencial. Tomamos el primer término que se corresponde con la energía cinética y que es un operador a un cuerpo:

$$\begin{aligned} \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi(\vec{q}') \rangle} &= \\ &= \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \rho_{l_1 l_2}^{10, NZ}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_N Z}) = \\ &= \text{Tr}[t\rho^{10, N}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_N})] + \text{Tr}[t\rho^{10, Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_Z})] \end{aligned} \quad (\text{D.16})$$

Para el término correspondiente al potencial estamos en el caso de un operador a dos cuerpos.

$$\begin{aligned} \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi(\vec{q}) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi(\vec{q}') \rangle} &= \\ \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi_N(\vec{q}) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_3} c_{l_4} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle} &+ \\ \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi_Z(\vec{q}) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_3} c_{l_4} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} &+ \\ \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi_Z(\vec{q}) | c_{l_1}^\dagger c_{l_3} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} & \cdot \\ \frac{\langle \Phi_N(\vec{q}) | c_{l_2}^\dagger c_{l_4} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle} &+ \\ \frac{1}{2} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \Phi_Z(\vec{q}) | c_{l_2}^\dagger c_{l_4} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} & \cdot \\ \frac{\langle \Phi_N(\vec{q}) | c_{l_1}^\dagger c_{l_3} e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle} & \end{aligned} \quad (\text{D.17})$$

Se definen los campos de Fock, apareamiento y la matriz densidad proyectada, respectivamente como:

$$\Gamma_{l_1 l_2}^{10, N/Z, N'/Z'}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_{N'/Z'}}) = \sum_{l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_3 l_2 l_4} \rho^{10, N'/Z'}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_{N'/Z'}}) \quad (\text{D.18})$$

$$\Delta_{l_1 l_2}^{10, N/Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_{N/Z}}) = \sum_{l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \kappa^{10, N/Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_{N/Z}}) \quad (\text{D.19})$$

$$\rho^{P, 10, N/Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta) = \sum_{l_N} \frac{e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\sum_{l_Z} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} \rho^{10, N/Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_{N/Z}}) \quad (\text{D.20})$$

De modo que la parte del hamiltoniano, ecuación (D.17), correspondiente a la energía potencial se obtiene:

$$\begin{aligned}
& \sum_{l_Z} \frac{e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\sum_{l_Z} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} \frac{1}{2} \text{Tr}[\Gamma^{10,Z,Z'}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_Z}) \rho^{10,Z'}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_Z})] + \\
& \sum_{l_Z} \frac{e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\sum_{l_Z} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} \frac{1}{2} \text{Tr}[\Gamma^{10,N,Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_Z}) \rho^{P,10,N}(\vec{q}, \vec{q}', \beta)] + \\
& \sum_{l_N} \frac{e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} \langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle}{\sum_{l_N} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} \langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle} \frac{1}{2} \text{Tr}[\Gamma^{10,Z,N}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_N}) \rho^{P,10,Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta)] - \\
& \sum_{l_Z} \frac{e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle}{\sum_{l_Z} e^{-i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \langle \Phi_Z(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \Phi_Z(\vec{q}') \rangle} \frac{1}{2} \text{Tr}[\Delta^{10,Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_Z}) \kappa^{01,Z}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_Z})] - \\
& \sum_{l_N} \frac{e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} \langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle}{\sum_{l_N} e^{-i\varphi_{l_N} \hat{N}} \langle \Phi_N(\vec{q}) | e^{-i\beta \hat{J}_x} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} | \Phi_N(\vec{q}') \rangle} \frac{1}{2} \text{Tr}[\Delta^{10,N}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_N}) \kappa^{01,N}(\vec{q}, \vec{q}', \beta, \varphi_{l_N})]
\end{aligned} \tag{D.21}$$

Por último, si sustituimos las definiciones anteriores en (D.10), se obtiene la expresión final más general de la energía:

$$E^{NZJ}(\vec{q}, \vec{q}') = \frac{\int_0^{\pi/2} d_{00}^{J*} e^{NZ}(\vec{q}, \vec{q}', \beta) n^{NZ}(\vec{q}, \vec{q}', \beta) \text{sen} \beta d\beta}{\int_0^{\pi/2} d_{00}^{J*} n^{NZ}(\vec{q}, \vec{q}', \beta) \text{sen} \beta d\beta} \tag{D.22}$$



# Apéndice E

## Elementos de matriz nuclear en una desintegración $0\nu\beta\beta$

En este apéndice se desarrollan con más detalle expresiones para los elementos de matriz nuclear (NME) para una desintegración doble beta sin emisión de neutrinos ( $0\nu\beta\beta$ ), dentro del marco de la teoría BMF cuyos resultados han sido discutidos en el capítulo 9. El elemento de matriz que queremos evaluar es:

$$M_{F/GT}^{0\nu} = \langle 0_i^+ | \hat{O}_{F(GT)}^{0\nu} | 0_f^+ \rangle \quad (\text{E.1})$$

El operador a dos cuerpos de la interacción se escribe como:

$$\hat{O}_{F/GT}^{0\nu} = \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\overline{O}_{F/GT}^{0\nu})_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger b_l b_k, \quad (\text{E.2})$$

donde los operadores de creación se definen como:

$a_i^\dagger |0\rangle \rightarrow$  crea un protón con números cuánticos  $i$

$b_j^\dagger |0\rangle \rightarrow$  crea un neutrón con números cuánticos  $j$

El término antisimetrizado que aparece en la expresión (E.2) será:

$$(\overline{O}_{F/GT}^{0\nu})_{ijkl} = \langle ij | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | kl \rangle - \langle ij | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | lk \rangle \quad (\text{E.3})$$

La desintegración doble beta es una transición que se da entre los estados fundamentales de dos núcleos diferentes, por lo que tendremos que:  $J = 0$  y  $\sigma = 0$ . De modo que para funciones PN-VAP con proyección PNAMP y

generador de coordenadas, sección 3.5, el elemento de matriz que queremos evaluar tiene la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \langle 0_i^+ | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | 0_f^+ \rangle &= \sum_{\vec{q}\vec{q}', k, k'} \left( \frac{u_k^{0, N_i, Z_i}(\vec{q})}{\sqrt{n_k^{0, N_i, Z_i}}} \right)^* \left( g_k^{0, N_i, Z_i} \right)^* \\ \langle P^{J=0} P^{N_i} P^{Z_i} \Phi(\vec{q}) | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | P^{J=0} P^{N_f} P^{Z_f} \Phi(\vec{q}') \rangle &\left( g_{k'}^{0, N_f, Z_f} \right) \left( \frac{u_{k'}^{0, N_f, Z_f}(\vec{q}')}{\sqrt{n_{k'}^{0, N_f, Z_f}}} \right) \end{aligned} \quad (\text{E.4})$$

Los dos paréntesis que aparecen a la derecha de la expresión, así como sus expresiones conjugadas que aparecen a la izquierda, vienen del cálculo GCM con la solución a la ecuación HW, de manera que lo que nos falta es evaluar el solape que aparece en el medio de la expresión. La diferencia frente a otras expresiones de cálculo de valores medios, como las desarrolladas en el apéndice anterior, es que este operador no conmuta con el número de partículas. Por ello, es necesario para el proyectador a buen número de partículas, definido en (3.62), tener en cuenta las siguientes propiedades:

$$a_i^\dagger P^Z = P^{Z-1} a_i^\dagger; \quad (\text{E.5})$$

$$b_j P^N = P^{N+1} b_j; \quad (\text{E.6})$$

$$P^{N_1} P^{N_2} = \delta_{N_1, N_2} P^{N_2}. \quad (\text{E.7})$$

El solape queda entonces:

$$\begin{aligned} \langle 0_i^+ | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | 0_f^+ \rangle &= \\ &= \frac{\langle P^0 P^{N_i} P^{Z_i} \Phi_i(\vec{q}) | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | P^0 P^{N_f} P^{Z_f} \Phi_f(\vec{q}') \rangle}{\sqrt{\langle P^0 P^{N_i} P^{Z_i} \Phi_i(\vec{q}) | P^0 P^{N_i} P^{Z_i} \Phi_i(\vec{q}') \rangle \langle P^0 P^{N_f} P^{Z_f} \Phi_f(\vec{q}) | P^0 P^{N_f} P^{Z_f} \Phi_f(\vec{q}') \rangle}} \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

Los operadores conmutan, esto es, se satisface:  $[\hat{O}_{F/GT}^{0\nu}, \hat{R}(\Omega)] = 0$ . Cada uno de los términos que aparecen en la raíz del denominador, que son iguales, se calcula como:

$$\begin{aligned} &\langle P^0 P^{N_i} P^{Z_i} \Phi_i(\vec{q}) | P^0 P^{N_i} P^{Z_i} \Phi_i(\vec{q}') \rangle = \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int D_{00}^*(\Omega) \langle \Phi_i(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) P^{N_i} P^{Z_i} | \Phi_i(\vec{q}') \rangle d\Omega \end{aligned} \quad (\text{E.9})$$

El solape que aparece dentro de la integral, se factoriza de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \langle \Phi_i(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) P^{N_i} P^{Z_i} | \Phi_i(\vec{q}') \rangle &= \left( \frac{1}{L} \sum_l \langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z)} | \Phi_{i,p}(\vec{q}') \rangle \right) \cdot \\ &\quad \left( \frac{1}{L} \sum_l \langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | \hat{R}(\Omega) e^{i\varphi_l(\hat{N}-N)} | \Phi_{i,n}(\vec{q}') \rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{E.10})$$

Por otro lado el numerador:

$$\begin{aligned} &\langle P^0 P^{N_i} P^{Z_i} \Phi_i(\vec{q}) | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} | P^0 P^{N_f} P^{Z_f} \Phi_i(\vec{q}') \rangle = \\ &= \frac{1}{8\pi^2} \int D_{00}^{0*}(\Omega) \langle \Phi_i(\vec{q}) | P^{N_i} P^{Z_i} \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} P^{N_f} P^{Z_f} \hat{R}(\Omega) | \Phi_f(\vec{q}') \rangle d\Omega = \\ &= \delta_{N_f, N_i-2} \delta_{Z_f, Z_i+2} \frac{1}{8\pi^2} \int D_{00}^{0*}(\Omega) \langle \Phi_i(\vec{q}) | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} P^{N_f} P^{Z_f} \hat{R}(\Omega) | \Phi_f(\vec{q}') \rangle d\Omega \end{aligned} \quad (\text{E.11})$$

De nuevo, aparece dentro de la integral un solape que debe ser evaluado:

$$\begin{aligned} &\langle \Phi_i(\vec{q}) | \hat{O}_{F/GT}^{0\nu} P^{N_f} P^{Z_f} \hat{R}(\Omega) | \Phi_f(\vec{q}') \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\bar{O}_{F/GT}^{0\nu})_{ijkl} \langle \Phi_i(\vec{q}) | a_i^\dagger a_j^\dagger b_l b_k P^{N_f} P^{Z_f} \hat{R}(\Omega) | \Phi_f(\vec{q}') \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\bar{O}_{F/GT}^{0\nu})_{ijkl} \langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | a_i^\dagger a_j^\dagger P^{Z_f} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,p}(\vec{q}') \rangle \langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | b_l b_k P^{N_2} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,n}(\vec{q}') \rangle = \\ &= \frac{1}{4} \sum_{ijkl} (\bar{O}_{F/GT}^{0\nu})_{ijkl} \\ &\quad \left( \frac{1}{L} \sum_l \frac{\langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | a_i^\dagger a_j^\dagger e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{i,p}(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{i,p}(\vec{q}') \rangle} \langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{i,p}(\vec{q}') \rangle \right) \cdot \\ &\quad \left( \frac{1}{L} \sum_l \frac{\langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | b_l b_k e^{i\varphi_l(\hat{N}-N_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{i,n}(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{N}-N_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{i,n}(\vec{q}') \rangle} \langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{N}-N_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{i,n}(\vec{q}') \rangle \right) \end{aligned} \quad (\text{E.12})$$

Definimos el tensor de apareamiento ( $\kappa$ ) y el campo de apareamiento ( $\Delta$ ) como:

$$\kappa_{ij}^{21,p}(\varphi_l, \Omega) = \frac{\langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | a_i^\dagger a_j^\dagger e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,p}(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,p}(\vec{q}') \rangle} \quad (\text{E.13})$$

$$\kappa_{ij}^{21,p,P}(\varphi_l, \Omega) = \frac{1}{L} \sum_l \kappa_{ij}^{21,p}(\varphi_l, \Omega) \langle \Phi_{i,p}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{Z}-Z_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,p}(\vec{q}') \rangle \quad (\text{E.14})$$

$$\kappa_{kl}^{12,n}(\varphi_l, \Omega) = \frac{\langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | b_l b_k e^{i\varphi_l(\hat{N}-N_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,n}(\vec{q}') \rangle}{\langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{N}-N_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,n}(\vec{q}') \rangle} \quad (\text{E.15})$$

$$\kappa_{kl}^{12,n,P}(\varphi_l, \Omega) = \frac{1}{L} \sum_l \kappa_{kl}^{12,n}(\varphi_l, \Omega) \langle \Phi_{i,n}(\vec{q}) | e^{i\varphi_l(\hat{N}-N_f)} \hat{R}(\Omega) | \Phi_{f,n}(\vec{q}') \rangle \quad (\text{E.16})$$

$$\left( \Delta_{F/GT}^{12,n,P}(\Omega) \right)_{ij} = \sum_{kl} \left( \overline{\mathcal{O}}_{F/GT}^{0\nu} \right)_{ijkl} \kappa_{kl}^{12,n,P}(\Omega) \quad (\text{E.17})$$

De modo que con las definiciones anteriores, obtenemos el valor del solape en el que estamos interesados:

$$\langle \Phi_i(\vec{q}) | \hat{\mathcal{O}}_{F/GT}^{0\nu} P^{N_f} P^{Z_f} \hat{R}(\Omega) | \Phi_f(\vec{q}') \rangle = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[ \Delta_{F/GT}^{12,n,P} (\kappa^{21,p,P})^t \right] \quad (\text{E.18})$$

# Índice de figuras

4.1.	Superficies de energía potencial versus $q$ para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	61
4.2.	Energía de apareamiento en MeV en el plano $(q, \delta)$ . . . . .	65
4.3.	PES 2D para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	67
4.4.	Convergencia de la energía en función de $\delta$ . . . . .	70
4.5.	Plateaus de la energía para los estados $0^+$ del núcleo $^{52}\text{Ti}$ . . .	72
4.6.	Energías de los estados $0^+$ en diferentes aproximaciones . . . . .	76
4.7.	Espectros para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	78
5.1.	Solapes de las normas para el $^{52}\text{Ti}$ caso 1D . . . . .	82
5.2.	Solapes de las normas para el $^{52}\text{Ti}$ caso 2D . . . . .	85
5.3.	Distribución del número de partículas 1D . . . . .	89
5.4.	Distribución del número de partículas 1D . . . . .	90
6.1.	Potenciales unidimensionales. Energías de apareamiento . . . . .	92
6.2.	PES 2D para el $^{54}\text{Cr}$ . . . . .	96
6.3.	PES 2D $^{24}\text{Mg}$ . . . . .	98
6.4.	PES 2D $^{32}\text{Mg}$ . . . . .	99
6.5.	PES 2D $^{50-54}\text{Ca}$ . . . . .	100
6.6.	Espectros para el $^{54}\text{Cr}$ . . . . .	102
6.7.	Espectros para el $^{32}\text{Mg}$ en diferentes aproximaciones. . . . .	105
6.8.	Espectros para el $^{24}\text{Mg}$ en diferentes aproximaciones . . . . .	107
6.9.	Espectros PN-VAP+PNAMP para los núcleos $^{50-54}\text{Ca}$ . . . . .	108
7.1.	Energías de separación de dos neutrones en los Mg . . . . .	112
7.2.	Probabilidades de transición E2 para Magnesios y Calcios . . . . .	114
7.3.	Energías $2_1^+$ para $^{50-54}\text{Ca}$ . . . . .	116
7.4.	Energías de excitación $0_2^+$ y $\rho^2$ . . . . .	119
8.1.	Funciones de onda 1D para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	125
8.2.	Vibraciones cuadrupolares 1D . . . . .	127
8.3.	Vibraciones cuadrupolares 2D . . . . .	128
8.4.	Vibraciones de apareamiento 1D . . . . .	129

---

8.5. Vibraciones de apareamiento 2D . . . . .	131
8.6. Funciones de onda 2D PN-VAP+PNAMP para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	133
8.7. Funciones de onda 2D HFB para el $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	136
9.1. PES y funciones de onda para $^{136}\text{Xe}$ y $^{136}\text{Ba}$ . . . . .	146
9.2. Elementos de matriz nuclear versus $q$ y $\delta$ . . . . .	148
9.3. Convergencia energía y NME . . . . .	152
9.4. Elementos de matriz nuclear con diferentes métodos . . . . .	153

# Índice de tablas

2.1. Parametrización D1S para la interacción de Gogny . . . . .	25
3.1. Comparación simetría rotacional y número de partículas . . . . .	38
4.1. Aproximaciones utilizadas para calcular las funciones de onda . . . . .	60
4.2. Energías de los estados $0^+$ en diferentes aproximaciones . . . . .	76
4.3. Energías de excitación y apareamiento con diferentes ligaduras . . . . .	79
5.1. Valores esperados para protones y neutrones . . . . .	88
6.1. Energías en valor absoluto para el $^{54}\text{Cr}$ . . . . .	104
7.1. Energías de separación entre dos protones para $N = 30$ . . . . .	113
7.2. Probabilidades de transición para el $^{54}\text{Cr}$ y $^{52}\text{Ti}$ . . . . .	115
7.3. Radio nuclear de carga para el estado $0_1^+$ en $^{24-34}\text{Mg}$ . . . . .	120
8.1. Valores máximos de $G$ en las funciones de onda . . . . .	137
9.1. Tabla observables desintegración $0\nu\beta\beta$ . . . . .	150





# Bibliografía

- [1] J. Sánchez Ron, J. Ordoñez, and V. Navarro, *Historia de la ciencia* (Espasa, 2004).
- [2] A. Jungclaus and J. L. Egidio, *Revista Española de Física*, vol 17, 3, pags. 55-64 (2003).
- [3] M. Borge and A. Poves, *Revista Española de Física* **22**, 4 (2008).
- [4] <http://www.gsi.de/en/research/fair.htm>, *GSI-FAIR*.
- [5] <http://www.ganil-spiral2.eu>, *GANIL-SPIRAL2*.
- [6] <https://hie-isolde.web.cern.ch/hie-isolde/>, *CERN-HIE-ISOLDE*.
- [7] <http://www.rarf.riken.go.jp/Eng/facilities/RIBF.html>, *RIBF-RIKEN*.
- [8] <http://www.frib.msu.edu>, *MSU-FRIB*.
- [9] R. Roth, J. Langhammer, A. Calci, S. Binder, and P. Navrátil, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 072501 (2011).
- [10] D. R. Entem and R. Machleidt, *Phys. Rev. C* **68**, 041001 (2003).
- [11] E. Epelbaum, H.-W. Hammer, and U.-G. Meißner, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 1773 (2009).
- [12] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, and A. P. Zuker, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 427 (2005).
- [13] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121 (2003).
- [14] T. R. Rodríguez and J. L. Egidio, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 062501 (2007).
- [15] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **74**, 064309 (2006).

- 
- [16] A. Valor, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Phys. Rev.* **C53**, 172 (1996).
- [17] T. R. Rodríguez, J. L. Egido, L. M. Robledo, and R. Rodríguez-Guzmán, *Phys. Rev. C* **71**, 044313 (2005).
- [18] J. F. Berger, M. Girod, and D. Gogny, *Nuclear Physics A* **428**, 23 (1984).
- [19] K. Sieja, A. Baran, and K. Pomorski, *Eur. Phys. J.* **A20**, 413 (2004).
- [20] C. Siegal and R. Sorensen, *Nuclear Physics A* **184**, 81 (1972).
- [21] Y. R. Shimizu, J. D. Garrett, R. A. Broglia, M. Gallardo, and E. Vigezzi, *Rev. Mod. Phys.* **61**, 131 (1989).
- [22] D. Bés, R. Broglia, J. Dudek, W. Nazarewicz, and Z. Szymański, *Annals of Physics* **182**, 237 (1988).
- [23] M. Kyotoku and H.-T. Chen, *Phys. Rev. C* **36**, 1144 (1987).
- [24] A. Staszczak, S. Piłat, and K. Pomorski, *Nuclear Physics A* **504**, 589 (1989).
- [25] G. Potel *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 092501 (2011).
- [26] N. Pillet, V. G. Zelevinsky, M. Dupuis, J.-F. Berger, and J. M. Daugas, *Phys. Rev. C* **85**, 044315 (2012).
- [27] N. L. Vaquero, T. R. Rodríguez, and J. L. Egido, *Physics Letters B* **704**, 520 (2011).
- [28] N. L. Vaquero, T. R. Rodríguez, and J. L. Egido, *Phys. Rev. C* **88**, 064311 (2013).
- [29] N. L. Vaquero, T. R. Rodríguez, and J. L. Egido, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 142501 (2013).
- [30] P. Navrátil, J. P. Vary, and B. R. Barrett, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5728 (2000).
- [31] S. C. Pieper and R. B. Wiringa, *Annual Review of Nuclear and Particle Science* **51**, 53 (2001).
- [32] K. Kowalski, D. J. Dean, M. Hjorth-Jensen, T. Papenbrock, and P. Piecuch, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 132501 (2004).

- [33] A. Bhor and B. R. Mottelson, *Nuclear Structure: Nuclear deformations*. (World Scientific, 1969).
- [34] M. G. Mayer, Phys. Rev. **74**, 235 (1948).
- [35] M. G. Mayer, Phys. Rev. **75**, 1969 (1949).
- [36] O. Haxel, J. H. D. Jensen, and H. E. Suess, Phys. Rev. **75**, 1766 (1949).
- [37] K. A. Brueckner, Phys. Rev. **97**, 1353 (1955).
- [38] S. Bogner, R. Furnstahl, and A. Schwenk, Progress in Particle and Nuclear Physics **65**, 94 (2010).
- [39] D. Gogny, Nuclear Physics A **237**, 399 (1975).
- [40] J. Dechargé and D. Gogny, Phys. Rev. C **21**, 1568 (1980).
- [41] J. S. Bell and T. H. R. Skyrme, Philosophical Magazine **1**, 1055 (1956).
- [42] T. H. R. Skyrme, Philosophical Magazine **1**, 1043 (1956).
- [43] D. Vautherin and D. M. Brink, Phys. Rev. C **5**, 626 (1972).
- [44] D. Vautherin, Phys. Rev. C **7**, 296 (1973).
- [45] B. Serot and J. Walecka, Advances in Nuclear Physics **16** (1986).
- [46] D. M. Brink and E. Boeker, Nuclear Physics A **91**, 1 (1967).
- [47] D. Gogny, *Nuclear selfconsistent fields* (North- Holland, 1975).
- [48] J. Berger, M. Girod, and D. Gogny, Computer Physics Communications **63**, 365 (1991), cited By (since 1996)359.
- [49] F. Chappert, M. Girod, and S. Hilaire, Physics Letters B **668**, 420 (2008).
- [50] S. Goriely, S. Hilaire, M. Girod, and S. Péru, Phys. Rev. Lett. **102**, 242501 (2009).
- [51] A. Wapstra, G. Audi, and C. Thibault, Nuclear Physics A **729**, 129 (2003), The 2003 {NUBASE} and Atomic Mass Evaluations.
- [52] G. Audi, A. Wapstra, and C. Thibault, Nuclear Physics A **729**, 337 (2003), The 2003 {NUBASE} and Atomic Mass Evaluations.

- [53] D. Lacroix, T. Duguet, and M. Bender, *Phys. Rev. C* **79**, 044318 (2009).
- [54] M. Bender, T. Duguet, and D. Lacroix, *Phys. Rev. C* **79**, 044319 (2009).
- [55] T. Duguet, M. Bender, K. Bennaceur, D. Lacroix, and T. Lesinski, *Phys. Rev. C* **79**, 044320 (2009).
- [56] M. Anguiano, J. L. Egidio, and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* **A696**, 467 (2001).
- [57] M. Anguiano, J. L. Egidio, and L. M. Robledo, *Phys. Lett.* **B545**, 62 (2002).
- [58] P. Ring and P. Schuck, *The Nuclear Many Body Problem* (Springer, 1980).
- [59] K. Heyde, *From nucleons to the atomic nucleus* (Springer-Verlag, 1998).
- [60] F. Iachello and A. Arima, *The Interacting Boson Model*. (Cambridge University Press, 1987).
- [61] A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines, *Phys. Rev.* **110**, 936 (1958).
- [62] J. Bardeen, N. L. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [63] N. Bogoliubov, *Sov. Phys. JETP* **7**, 41 (1958).
- [64] C. Bloch and A. Messiah, *Nuclear Physics* **39**, 95 (1962).
- [65] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus* (Springer, 2007).
- [66] D. J. Thouless, *Nuclear Physics* **21**, 225 (1960).
- [67] J. L. Egidio, J. Lessing, V. Martin, and L. M. Robledo, *Nuclear Physics A* **594**, 70 (1995).
- [68] H. Mang, *Physics Reports* **18**, 325 (1975).
- [69] J. L. Egidio and P. Ring, *Nuclear Physics A* **383**, 189 (1982).
- [70] F. K.W. Schmid, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **52**, 565 (2004).
- [71] K. Dietrich, H. J. Mang, and J. H. Pradal, *Phys. Rev.* **135**, B22 (1964).

- [72] J. L. Egido and P. Ring, Nuclear Physics A **388**, 19 (1982).
- [73] M. V. Stoitsov, J. Dobaczewski, R. Kirchner, W. Nazarewicz, and J. Terasaki, Phys. Rev. C **76**, 014308 (2007).
- [74] V. Fomenko, J.Phys (G.B) A3,8 (1970).
- [75] N. Onishi and S. Yoshida, Nuclear Physics **80**, 367 (1966).
- [76] R. E. Peierls and J. Yoccoz, Proc. Phys. Soc. (London) A 70 381 (1957).
- [77] A. Messiah, *Quantum mechanics* (North- Holland, 1962).
- [78] R. Rodríguez-Guzman, J. L. Egido, and L. M. Robledo, Nucl. Phys. **A709**, 201 (2002).
- [79] J. Dobaczewski, M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz, and P.-G. Reinhard, Phys. Rev. C **76**, 054315 (2007).
- [80] G. Hupin, D. Lacroix, and M. Bender, Phys. Rev. C **84**, 014309 (2011).
- [81] A. Valor, J. Egido, and L. Robledo, Nuclear Physics A **665**, 46 (2000).
- [82] A. Valor, J. Egido, and L. Robledo, Physics Letters B **392**, 249 (1997).
- [83] R. Rodríguez-Guzman, J. L. Egido, and L. M. Robledo, Phys. Rev. **C65**, 024304 (2002).
- [84] P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, P. H. Heenen, and J. Meyer, Nuclear Physics A **510**, 466 (1990).
- [85] M. Bender and P.-H. Heenen, Phys. Rev. C **78**, 024309 (2008).
- [86] J. M. Yao, J. Meng, P. Ring, and D. Vretenar, Phys. Rev. C **81**, 044311 (2010).
- [87] T. R. Rodríguez and J. L. Egido, Phys. Rev. C **81**, 064323 (2010).
- [88] R. Broglia and V. Zelevinsky, editors, *Fifty years of nuclear BCS*. (World Scientific, 2013).
- [89] M. Baranger, Phys. Rev. **122**, 992 (1961).
- [90] D. L. Hill and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **89**, 1102 (1953).
- [91] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, Phys. Rev. **108**, 311 (1957).

- [92] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Phys. Rev.* **C62**, 054308 (2000).
- [93] R. R. Rodríguez-Guzmán, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Phys. Rev.* **C62**, 054319 (2000).
- [94] J. Egido, L. Robledo, and Y. Sun, *Nuclear Physics A* **560**, 253 (1993).
- [95] R. Broglia, O. Hansen, and C. Riedel, *Advances in Nuclear Physics* **6** (1973).
- [96] D. Bes, R. Broglia, R. Perazzo, and K. Kumar, *Nuclear Physics A* **143** (1967).
- [97] A. Gozdz, K. Pomorski, M. Brack, and E. Werner, *Nuclear Physics A* **442** (1985).
- [98] L. Pròchniak, K. Z. ac, K. Pomorski, S. Rohoziński, and J. Srebrny, *Nucl. Phys. A* **648**, 181 (1999).
- [99] K. Z. ac, L. Pròchniak, K. Pomorski, S. Rohoziński, and J. Srebrny, *Nucl. Phys. A* **653**, 71 (1999).
- [100] M. A. Fernández and J. L. Egido, *Eur. Phys. J B* **48**, 305 (2005).
- [101] M. A. Fernández and J. L. Egido, *Phys. Rev. B* **68**, 184505 (2003).
- [102] A. Faessler, F. Grümmer, A. Plastino, and F. Krmpotić, *Nuclear Physics A* **217**, 420 (1973).
- [103] J. Meyer, P. Bonche, J. Dobaczewski, H. Flocard, and P. H. Heenen, *Nuclear Physics A* **533**, 307 (1991).
- [104] M. Anguiano, J. L. Egido, and L. M. Robledo, *Nucl. Phys.* **A683**, 227 (2001).
- [105] A. Kamlah, *Phys.* **216** **52** (1968).
- [106] H. Zduńczuk, J. Dobaczewski, and W. Satula, *International Journal of Modern Physics E* **16**, 377 (2007).
- [107] D. Guillemaud-Mueller *et al.*, *Nuclear Physics A* **426**, 37 (1984).
- [108] T. Motobayashi *et al.*, *Physics Letters B* **346**, 9 (1995).
- [109] A. Arcones and G. Martínez-Pinedo, *Phys. Rev. C* **83**, 045809 (2011).

- [110] *ENDSF database* <http://www.nndc.bnl.gov/ensdf>.
- [111] A. D. Shalit and H. Feshbach, *Theoretical Nuclear Physics: Nuclear Structure v. 1* (John Wiley and Sons, 1974).
- [112] A. Poves, F. Nowacki, and E. Caurier, *Phys. Rev. C* **72**, 047302 (2005).
- [113] D.-C. Dinca *et al.*, *Phys. Rev. C* **71**, 041302 (2005).
- [114] J. J. Valiente-Dobón *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 242502 (2009).
- [115] W. Schwerdtfeger *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 012501 (2009).
- [116] A. Bürger *et al.*, *Physics Letters B* **622**, 29 (2005).
- [117] M. Hamermesh, *Phys. Rev.* **75**, 1766 (1949).
- [118] T. Otsuka *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 082502 (2001).
- [119] J. I. Prisciandaro *et al.*, *Physics Letters B* **510**, 17 (2001).
- [120] D. Steppenbeck *et al.*, *Nature* **502**, 207 (2013).
- [121] J. Wood, K. Heyde, W. Nazarewicz, M. Huyse, and P. van Duppen, *Physics Reports* **215**, 101 (1992).
- [122] J. Wood, E. Zganjar, C. D. Coster, and K. Heyde, *Nuclear Physics A* **651**, 323 (1999).
- [123] K. Heyde and J. L. Wood, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1467 (2011).
- [124] A. Poves, F. Nowacki, and E. Caurier, *INPC 2013 International Nuclear Physics Conference* **66** (2013).
- [125] T. Kibédi and R. Spear, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **89**, 77 (2005).
- [126] D. T. Yordanov *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 042504 (2012).
- [127] F. T. Avignone, S. R. Elliott, and J. Engel, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 481 (2008).
- [128] M. Goeppert-Mayer, *Phys. Rev.* **48**, 512 (1935).
- [129] S. R. Elliott, A. A. Hahn, and M. K. Moe, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 2020 (1987).

- [130] A. S. Barabash, Phys. Rev. C **81**, 035501 (2010).
- [131] W. H. Furry, Phys. Rev. **56**, 1184 (1939).
- [132] H. Klapdor-Kleingrothaus, I. Krivosheina, A. Dietz, and O. Chkvorets, Physics Letters B **586**, 198 (2004).
- [133] GERDA Collaboration, M. Agostini *et al.*, Phys. Rev. Lett. **111**, 122503 (2013).
- [134] EXO Collaboration, M. Auger *et al.*, Phys. Rev. Lett. **109**, 032505 (2012).
- [135] KamLAND-Zen Collaboration, A. Gando *et al.*, Phys. Rev. Lett. **110**, 062502 (2013).
- [136] GERDA Collaboration, M. Agostini *et al.*, (2013), 1307.4720.
- [137] K. Ackermann *et al.*, Eur. Phys. J C **73** (2013).
- [138] I. Ogawa *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **375** (2012).
- [139] K. Zuber, Progress in Particle and Nuclear Physics **64**, 267 (2010).
- [140] D. G. Phillips *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **381** (2012).
- [141] NEMO Collaboration, J. Argyriades *et al.*, Phys. Rev. C **80**, 032501 (2009).
- [142] SNO+ Collaboration, K. Zuber, AIP Conf.Proc. **942**, 101 (2007).
- [143] H. Bhang *et al.*, J. Phys.: Conf. Ser. **375** (2012).
- [144] C. Arnaboldi *et al.*, Phys. Rev. C **78**, 035502 (2008).
- [145] M. Carrettoni, Journal of Physics: Conference Series **347**, 012031 (2012).
- [146] V. Álvarez *et al.*, JINST **8**, P04002 (2013).
- [147] F. Šimkovic, G. Pantis, J. D. Vergados, and A. Faessler, Phys. Rev. C **60**, 055502 (1999).
- [148] F. Šimkovic, A. Faessler, V. Rodin, P. Vogel, and J. Engel, Phys. Rev. C **77**, 045503 (2008).



- [149] D.-L. Fang, A. Faessler, V. Rodin, and F. Šimkovic, *Phys. Rev. C* **83**, 034320 (2011).
- [150] M. Kortelainen and J. Suhonen, *Phys. Rev. C* **75**, 051303 (2007).
- [151] M. T. Mustonen and J. Engel, *Phys. Rev. C* **87**, 064302 (2013).
- [152] E. Caurier, J. Menéndez, F. Nowacki, and A. Poves, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 052503 (2008).
- [153] J. Menéndez, A. Poves, E. Caurier, and F. Nowacki, *Nuclear Physics A* **818**, 139 (2009).
- [154] A. Neacsu, S. Stoica, and M. Horoi, *Phys. Rev. C* **86**, 067304 (2012).
- [155] J. Barea and F. Iachello, *Phys. Rev. C* **79**, 044301 (2009).
- [156] J. Barea, J. Kotila, and F. Iachello, *Phys. Rev. C* **87**, 014315 (2013).
- [157] P. K. Rath, R. Chandra, K. Chaturvedi, P. K. Raina, and J. G. Hirsch, *Phys. Rev. C* **82**, 064310 (2010).
- [158] T. R. Rodríguez and G. Martínez-Pinedo, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 252503 (2010).
- [159] T. R. Rodríguez and G. Martínez-Pinedo, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **66**, 436 (2011).
- [160] T. R. Rodríguez and G. Martínez-Pinedo, *Physics Letters B* **719**, 174 (2013).
- [161] J. Kotila and F. Iachello, *Phys. Rev. C* **85**, 034316 (2012).
- [162] W. Haxton and G. S. Jr., *Progress in Particle and Nuclear Physics* **12**, 409 (1984).
- [163] M. Doi, T. Kotani, and E. Takasugi, *Progress of theoretical and experimental Physics* **83** (1985).
- [164] G. A. Miller and J. E. Spencer, *Annals of Physics* **100**, 562 (1976).
- [165] H. Feldmeier, T. Neff, R. Roth, and J. Schnack, *Nuclear Physics A* **632**, 61 (1998).
- [166] M. Kortelainen, O. Civitarese, J. Suhonen, and J. Toivanen, *Physics Letters B* **647**, 128 (2007).

- 
- [167] J. P. Delaroche *et al.*, Phys. Rev. C **81**, 014303 (2010).
- [168] M. Wang *et al.*, Chinese Phys. C **36** (2012).
- [169] I. Angeli, Atomic Data and Nuclear Data Tables **87**, 185 (2004).
- [170] K. Yako *et al.*, Phys. Rev. Lett. **103**, 012503 (2009).
- [171] R. Madey *et al.*, Phys. Rev. C **40**, 540 (1989).
- [172] R. L. Helmer *et al.*, Phys. Rev. C **55**, 2802 (1997).
- [173] H. Dohmann *et al.*, Phys. Rev. C **78**, 041602 (2008).
- [174] S. Rakers *et al.*, Phys. Rev. C **71**, 054313 (2005).
- [175] R. Álvarez-Rodríguez *et al.*, Phys. Rev. C **70**, 064309 (2004).
- [176] J. Menéndez, D. Gazit, and A. Schwenk, Phys. Rev. Lett. **107**, 062501 (2011).
- [177] M. G. S. Hilaire, The European Physical Journal A **33**, 237 (2007).
- [178] J. Menendez, A. Poves, E. Caurier, and F. Nowacki, Phys.Rev. **C80**, 048501 (2009).
- [179] J. Menéndez, T. R. Rodríguez, G. Martínez-Pinedo, and A. Poves, (2014), 1401.0651.
- [180] R. Balian and E. Brezin, Il Nuovo Cimento **64B**, 37 (1969).
- [181] K. Neergård and E. Wüst, Nuclear Physics A **402**, 311 (1983).

# Agradecimientos

Quiero empezar expresando mi profundo agradecimiento a mi director de tesis, José Luis Egido, por todas las discusiones mantenidas, por el tiempo dedicado, por los artículos publicados, por su paciencia, por enseñarme el valor del trabajo bien hecho, por todo lo que me has enseñado y ayudado para que este proyecto haya salido adelante.

También me gustaría agradecer a Andrea Jungclaus haberme dado la oportunidad de iniciar este viaje en la investigación.

He tenido la suerte de conocer y trabajar con Tomás R. Rodríguez, del que tanto he aprendido. A él también le debo mi agradecimiento más sincero. Gracias por estar siempre disponible, por todas las explicaciones y las mil dudas resueltas. Por todos los ratos juntos y sobre todo por tu amistad.

Los mejores compañeros de despacho que se puede tener me han tocado a mí: Alfonso, Andrés y Fermín. Gracias por los *scripts*, por resolverme cada una de las mil dudas de Linux y Latex con una sonrisa, y por todos los buenos momentos que hemos pasado en el 310 y fuera de él. Gracias a Marta por sacarme de la soledad que se había apoderado del 310.

Gracias a todos los compañeros físicos con los que he coincidido en la carrera y en el doctorado. Con ellos he compartido discusiones, comidas, clases, ratos de problemas tesis y tesinas y que tanto me han ayudado y enseñado: Christian, Laura, Arturo, Víctor, Jose, Paola, África, Javi, Luz, Adolfo, Jacobo, Fernando, Irene y todos los compañeros del Curso de Doctorado en Física Nuclear.

Gracias al Dpto de Física Teórica y todas las personas que lo forman, por poner a mi disposición todos los recursos necesarios para desarrollar mi trabajo, por ayudarme en todo lo que estaba en su mano, por facilitarme las cosas. En especial a la parte de secretaría: Ana, Yedra, Marcia y Alfredo (y a todos sus predecesores) e informática: J. Larrea y F. Campos, por ayudar-

nos en la parte computacional y en todos los sustos que hemos tenido con el cluster.

Gracias a mis amigos de siempre por acompañarme en el camino: Alba, Nuria, Eva, Cristina, Laura, Keko, Itatí, Kike, Mariangeles, María, Mamen, Pablo y Nanu. Gracias por estar siempre ahí, por dejarme compartir tantos momentos desde hace tanto tiempo: tesis, trabajos, amores, casas y ahora niños. Con vosotros las alegrías son mayores y los problemas más pequeños. Gracias a Diana, Jose, Nacho y Paloma por enseñarme que a veces la amistad son piezas de un tangram que simplemente encajan.

Gracias a Raquel y Dani por vuestro apoyo en tantas cosas, por Turquía y la Ñiversitesis, por los miernes, por los buenos ratos a vuestro lado y los que vendrán.

Gracias a Pedro Marga y Amaya por todos los trastes y tortillas que hemos compartido mientras se fraguaba esta tesis.

Gracias a Neo por su cariño incondicional, por los paseos que despejan y clarifican la mente y en los que arreglamos el mundo.

Gracias a Guille y David por vuestras clases para ayudarme con el *mens sana in corpore sano* en toda esta etapa.

No querría olvidarme de Domingo Diana y Clara, gracias por vuestro interés constante y las palabras de aliento.

Por último, gracias a mi familia, por ser lo más importante en todo lo que hago. Gracias a mis abuelos por enseñarme el significado de la palabra esfuerzo. Gracias a mi padres: Javier y Mari Paz por su apoyo infinito en cada cosa que emprendo, por enseñármelo todo, por ser el ejemplo de lo que quiero ser. Gracias a mi hermana Marta, por llenar mi vida de color hace 21 años, por enseñarme otra forma de ver las cosas, por ser la mejor hermana del mundo.

Gracias a Gus, por ser mi mitad en todos los sentidos, por ser mi presente y mi futuro. Gracias por tus consejos, los ratos de trabajo en casa, tu cariño, tu infinita ayuda, tu paciencia, por darme los empujones y ánimos necesarios para escribir esta tesis, por ser el motor de lo que hago y dejarme compartirlo todo contigo.