

UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE MADRID

FACULTAD DE CIENCIAS



IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE LA  
COORDENADA GENERADORA CON  
INTERACCIONES NUCLEARES  
GENÉRICAS: EL PROYECTO TAURUS

TESIS PRESENTADA POR ADRIÁN SÁNCHEZ FERNÁNDEZ  
PARA OBTENER EL GRADO DE DOCTOR EN CIENCIAS FÍSICAS

Trabajo dirigido por Tomás R. Rodríguez Frutos

2022

Departamento de Física Teórica

*A mis padres, profesores y  
alumnos, de los cuales todavía sigo  
aprendiendo.*

---

# Resumen

Los métodos de campo medio y más allá de campo medio se han desarrollado ampliamente durante las últimas décadas para estudiar la estructura de los núcleos atómicos desde el punto de vista teórico a partir de aproximaciones variacionales. La gran mayoría de las aplicaciones de estos métodos están basadas en funcionales de la densidad no-relativistas (Skyrme, Gogny) o relativistas. Además, las funciones de onda de campo medio empleadas en dichos cálculos están normalmente restringidas para cumplir ciertas simetrías que simplifiquen el problema teórico.

El trabajo de tesis que aquí se presenta forma parte de un proyecto ambicioso llamado TAURUS (Theory for A Unified descRition of nUclear Structure), en el que se desarrolla desde cero el método de la coordenada generadora (*Generator Coordinate Method*, GCM) con funciones de onda de tipo Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) proyectadas a buenos números cuánticos. Las ventajas de este nuevo desarrollo son: 1) el uso de transformaciones HFB lo más generales posibles en las que únicamente se impone que éstas sean reales y no complejas; 2) la restauración simultánea del momento angular, número de partículas (protones y neutrones) y paridad; 3) la posibilidad de estudiar núcleos pares e impares, así como excitaciones colectivas y monoparticulares gracias al mecanismo de bloqueo; 4) el uso potencial de cualquier interacción nuclear efectiva a dos cuerpos.

Gracias a este desarrollo teórico y computacional, en este trabajo se ha comprobado la capacidad de los métodos variacionales para reproducir los resultados provenientes de la diagonalización exacta de hamiltonianos no-triviales ampliamente empleados en cálculos del modelo de capas. Así, se han utilizado las interacciones USD y KB3G, definidos en los espacios de valencia *sd* y *pf* respectivamente, para hacer las correspondientes comparaciones. En particular, se ha analizado en núcleos

individuales el papel que juegan los grados de libertad colectivos, como la deformación cuadrupolar y los distintos canales de apareamiento (incluyendo como novedad los apareamientos protón-neutrón isoescalar e isovectorial), en la descripción de los espectros. Además, se han realizado estudios sistemáticos en los isótopos de calcio (pares e impares) en la capa  $pf$  y de los núcleos (par-par, par-impar e impar-impar) de la capa  $sd$ , obteniéndose resultados próximos a los exactos cuando se incorporan la gran mayoría de los grados de libertad colectivos en el método.

Por último, se ha realizado el cálculo de elementos de matriz asociados a las desintegraciones electromagnéticas,  $\beta$  y  $\beta\beta$  sin emisión de neutrinos para mostrar la capacidad de estos métodos para reproducir transiciones.

---

# Abstract

Mean Field and Beyond Mean Field methods have been broadly developed during the last decades in order to study the structure of atomic nuclei from a theoretical perspective starting from variational approximations. Most of the applications of these methods are based in non-relativistic (Skyrme, Gogny) or relativistic density functionals. Furthermore, mean field wave functions used in those calculations are usually constrained to certain symmetries that simplify the theoretical problem.

This thesis work here exposed is part of an ambitious project called TAURUS (Theory for A Unified descRition of nUclear Structure), a computational suite based on the Generator Coordinate Method (GCM) that uses Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB)-like wave functions projected onto good quantum numbers. The advantages of this new work are: 1) implementation of the most general HFB real transformations; 2) simultaneous restoration of angular momentum, particle number (protons and neutrons) and parity; 3) capability of describing even and odd nuclei, as well as collective and single-particle excitations thanks to the blocking mechanism; 4) potential use of any of the two body effective nuclear interactions.

Thanks to this theoretical and computational development, the ability of variational methods to reproduce the results from the exact diagonalization of non-trivial Hamiltonians, widely used in shell model calculations, has been tested. Then, USD and KB3G interactions, defined within  $sd$  and  $pf$  valence spaces, were used to make the corresponding comparisons. Particularly, the role of collective degrees of freedom, such as quadrupole deformations and all possible pairing channels (including as a novelty isoscalar and isovectorial proton-neutrons channels) in the description of energy spectra were analysed. Moreover, systematic studies in calcium isotopes (even and odd) in the  $pf$ -shell and in  $sd$ -shell even-even, even-odd and odd-odd nuclei were

carried out, obtaining results near to the exact ones when all of the collective degrees of freedom are taken into account in this method.

Finally, matrix elements of electromagnetic,  $\beta$  and  $\beta\beta$  without neutrino emission decays were calculated to show the ability of these methods to reproduce these transitions.

---

# Índice general

<b>1. Introducción</b>	<b>1</b>
1.1. Motivación del proyecto TAURUS . . . . .	1
1.2. Estructura de la memoria . . . . .	5
<b>2. Modelos nucleares</b>	<b>7</b>
2.1. Una breve introducción histórica . . . . .	7
2.2. Modelo de capas . . . . .	8
2.3. Métodos de campo medio autoconsistentes . . . . .	10
2.4. El problema de la interacción nuclear . . . . .	13
<b>3. PGCM con la suite TAURUS</b>	<b>17</b>
3.1. Introducción . . . . .	17
3.2. Construcción de los estados intrínsecos . . . . .	20
3.2.1. Función de onda HFB: estructura y simetrías autoconsistentes	20
3.2.2. Imposición de ligaduras . . . . .	24
3.2.3. Ecuaciones variacionales HFB y PNVAP . . . . .	27
3.2.4. El método del gradiente . . . . .	35
3.3. Proyección de estados intrínsecos a buenos números cuánticos . . . . .	36
3.3.1. Proyección simultánea a buen número de partículas, momento angular y paridad . . . . .	37
3.3.2. Obtención del solape de la norma . . . . .	40
3.3.3. Obtención del solape del hamiltoniano . . . . .	42
3.3.4. Aspectos numéricos de la proyección . . . . .	45
3.4. Ansatz GCM . . . . .	49

3.4.1.	Conceptos fundamentales . . . . .	49
3.4.2.	Algunos observables de interés . . . . .	51
3.5.	Un ejemplo de aplicación . . . . .	57
3.5.1.	Obtención de los estados intrínsecos . . . . .	58
3.5.2.	Proyección a buen momento angular y número de partículas . . . . .	60
3.5.3.	Mezcla de configuraciones. Resolución de la ecuación de HWG y propiedades EM . . . . .	63
<b>4.</b>	<b>Comparación de resultados PGCM y SM I</b>	<b>69</b>
4.1.	Cálculos sin ligaduras . . . . .	70
4.1.1.	Caso par-par: $^{24}\text{Ne}$ . . . . .	70
4.1.2.	Caso par-impar: $^{25}\text{Ne}$ . . . . .	76
4.1.3.	Caso impar-impar: $^{24}\text{Na}$ . . . . .	80
4.1.4.	Cálculos sistemáticos de las energías de estados fundamentales	83
4.2.	Cálculos con ligaduras . . . . .	86
4.2.1.	Estudio preliminar del $^{24}\text{Ne}$ . . . . .	88
4.2.2.	Cálculos sistemáticos PGCM . . . . .	92
4.3.	Resumen . . . . .	103
<b>5.</b>	<b>Comparación de resultados PGCM y SM II</b>	<b>107</b>
5.1.	Descripción de la estructura del $^{48}\text{Ca}$ . . . . .	108
5.1.1.	Superficies de energía y correlaciones de apareamiento $nn$ . . . . .	108
5.1.2.	Espectro de energías y probabilidades de transición . . . . .	110
5.1.3.	Funciones de onda colectivas y números de ocupación . . . . .	112
5.2.	Generalización a toda la cadena isotópica del Ca . . . . .	117
5.2.1.	Estados fundamentales y espectros de bajas energías . . . . .	117
5.2.2.	Números de ocupación y dimensión del Hamiltoniano . . . . .	122
<b>6.</b>	<b>Correlaciones de apareamiento como coordenada generadora</b>	<b>127</b>
6.1.	Introducción . . . . .	127
6.2.	Exploración explícita de las correlaciones de apareamiento . . . . .	132
6.2.1.	Formación de pares $pn$ en las capas $sd$ y $pf$ . . . . .	134
6.2.2.	Variación explícita del apareamiento mediante ligaduras . . . . .	137
6.3.	Probabilidades de transición Gamow-Teller con el método PGCM . . . . .	144



6.4. Elementos de matriz nucleares de la desintegración $0\nu\beta\beta$ . . . . .	149
6.4.1. Análisis de la desintegración del $^{48}\text{Ca}$ al $^{48}\text{Ti}$ . . . . .	150
6.4.2. Generalización a desintegraciones $^A\text{Ca} \rightarrow ^A\text{Ti}$ . . . . .	161
<b>7. Conclusiones y perspectivas de trabajo futuro</b>	<b>167</b>
<b>A. Probabilidades de transición electromagnéticas</b>	<b>173</b>
A.1. Definiciones . . . . .	173
A.2. Cálculo explícito del solape entre estados proyectados . . . . .	175
A.3. Elementos de matriz de los operadores multipolares . . . . .	178
A.3.1. Operador multipolar eléctrico . . . . .	179
A.3.2. Operador multipolar magnético . . . . .	181
<b>B. Probabilidades de transición <math>\beta</math></b>	<b>185</b>
B.1. Definiciones . . . . .	185
B.2. Cálculo explícito del solape entre estados proyectados . . . . .	186
B.3. Elementos de matriz de los operadores de Gamow-Teller y Fermi . . .	190
<b>Bibliografía</b>	<b>204</b>

---

# Capítulo 1

## Introducción

### 1.1. Motivación del proyecto TAURUS

Casi noventa años han pasado desde el descubrimiento del neutrón [1], hecho que –podríamos afirmar– marcó el origen de la física nuclear. Desde entonces, y gracias al desarrollo teórico de la mecánica cuántica, hemos podido conocer con mayor profundidad la estructura y propiedades del núcleo atómico.

Sin embargo, el estudio a nivel teórico de la estructura nuclear se encuentra con grandes dificultades. En primer lugar, en comparación con otras fuerzas fundamentales de la naturaleza, la interacción nuclear se conoce relativamente poco. Este hecho, puede atribuirse –entre otros motivos– a la inaccesibilidad experimental hasta finales la década de 1960[2] y a la propia complejidad de los modelos teóricos existentes. En segundo lugar, el número de partículas que está en juego en este tipo de sistemas también resulta un inconveniente. Desafortunadamente, el núcleo atómico no es ni lo suficientemente ligero como para poder resolver exactamente las ecuaciones que rigen su dinámica, ni lo suficientemente grande como para poder aplicar mecánica estadística. Esta dificultad en el tratamiento teórico del núcleo ha hecho que, desde mediados del siglo XX hasta ahora, se hayan desarrollado multitud de técnicas para poder acercarnos lo más posible a la verdadera naturaleza de lo que se conoce como *el problema de muchos cuerpos nuclear*.

El desarrollo de estas herramientas teóricas no solo hace que podamos dar explicación a las mediciones experimentales más conocidas –energías de ligadura, espectros

de energía de excitación, emisiones de radiación EM etc.–, sino que permite explorar fenómenos y situaciones para las que todavía no hay experimentación posible, como es el caso de las desintegraciones  $\beta$  doble sin neutrinos (abreviado habitualmente  $0\nu\beta\beta$ ). Estos problemas, además, suelen ser de importancia compartida con otros campos de estudio, tales como la física de partículas o la astrofísica.

A nivel teórico el problema de la estructura nuclear es difícil de abordar principalmente por dos motivos: la complejidad de las interacciones nucleares y las dimensiones del problema, que con muy pocos cuerpos ya se hace irresoluble.

Con respecto a las interacciones, en las últimas décadas se han producido avances muy importantes para conectar la teoría de la interacción fuerte –esto es, la cromodinámica cuántica (*Quantum Chromodynamics*, QCD)– con las interacciones entre los nucleones constituyentes del núcleo. En particular, a través de la teoría de campos efectiva quiral[3, 4] (*Chiral Effective Field Theory*,  $\chi$ EFT) y los métodos de renormalización como el *Similarity Renormalization Group* (SRG)[5, 6], se han podido producir interacciones efectivas que, además de preservar la descripción adecuada de los experimentos de dispersión nucleón-nucleón (desfasajes) y de núcleos muy ligeros[7], se pueden usar en cálculos de estructura nuclear[8, 9]. A los cálculos que emplean este tipo de interacciones se les etiqueta como de primeros principios o *ab initio*, aunque en –prácticamente– la totalidad de dichos cálculos se emplean aproximaciones, tanto en las interacciones efectivas finales como en el método de resolución del problema de muchos cuerpos. De hecho, el grado de acuerdo que se alcanza con el experimento y el rango limitado de núcleos en los que se pueden aplicar hacen que los métodos *ab initio* estén todavía en una fase temprana de desarrollo. Por tanto, todavía se tiene que recurrir a interacciones nucleares efectivas fenomenológicas (ajustadas a propiedades de núcleos no necesariamente ligeros) que proporcionen buenas predicciones e interpretaciones teóricas de los datos experimentales.

Por otra parte, la resolución exacta de la ecuación de Schrödinger nuclear resulta inabordable a partir de un número no muy grande de nucleones en el sistema. Por tanto, se debe recurrir a modelos nucleares que simplifiquen el problema sin perder la capacidad predictiva de la teoría. En este sentido, los dos métodos más usados para resolver el problema de muchos cuerpos nuclear son el modelo de capas con interacción[10] (*Interacting Shell Model*, ISM) y los métodos de campo medio

autoconsistente[11] (*Self-Consistent Mean Field*, SCMF) y sus extensiones más allá del campo medio[12] (*Beyond-Mean Field Approximations*, BMFA).

En el primero de los casos, el problema se divide en un conjunto de nucleones inerte (*core*) y unos nucleones de valencia que pueden ocupar estados monoparticulares en un espacio de valencia restringido. El *core* se elige habitualmente como un núcleo con números mágicos cercano y el espacio de valencia suele comprender un número limitado de órbitas de oscilador armónico (con término de espín-órbita) por encima de dicho *core*. La fuerza nuclear con la que interaccionan los nucleones de valencia está adaptada a dicho espacio de valencia y habitualmente contiene ajustes fenomenológicos (energías de partícula independiente y elementos de matriz a dos cuerpos que se modifican para reproducir ciertos valores experimentales en esa región de núcleos). Recientemente se están empleando también interacciones efectivas de tipo *ab initio*[13–15] aunque las más empleadas siguen teniendo una fuerte componente fenomenológica. Una vez que el problema está definido en el espacio de valencia, éste se resuelve exactamente diagonalizando el hamiltoniano en bases de enormes dimensiones definidas por determinantes de Slater. La combinación de considerar interacciones ajustadas a regiones específicas y de realizar una diagonalización exacta hacen del modelo de capas con interacción el mejor método que existe en la actualidad para reproducir espectros nucleares. Sin embargo, este método no es universal ya que está limitado a núcleos que no se encuentren muy lejos de los cierres de capas, y tiene el inconveniente de que las interacciones se deben ajustar a los espacios de valencia usados.

Una perspectiva diferente de abordar el problema de muchos cuerpos nuclear es la que proporciona la aproximación de campo medio y sus extensiones. En este caso se usa el método variacional para hallar soluciones aproximadas usando espacios variacionales de funciones de onda cada vez más complejas, empezando con funciones de onda de campo medio o de tipo producto (como en el método de Hartree-Fock-Bogoliubov, HFB), continuando con la restauración de las simetrías rotas a nivel de campo medio mediante la proyección a buenos números cuánticos (momento angular, paridad, número de protones y neutrones, etc.), y finalizando con la mezcla de configuraciones mediante, por ejemplo, el método de la coordenada generadora[16, 17] (*Generator Coordinate Method*, GCM).

Esta tesis doctoral se enmarca precisamente en el desarrollo de las técnicas de campo medio y más allá de este. Más concretamente, este trabajo forma parte del proyecto TAURUS que persigue una descripción completa de la estructura nuclear usando métodos variacionales con interacciones nucleares genéricas, siendo la aproximación más sofisticada empleada el método del generador de coordenadas con funciones de onda proyectadas a buen número de partículas, paridad y momento angular (*Projected Generator Coordinate Method*, PGCM). Este método ha sido ampliamente utilizado en cálculos de estructura nuclear en las últimas dos décadas con interacciones efectivas fenomenológicas dependientes de la densidad (*Energy Density Functionals*, EDF) tales como Skyrme[18], Gogny[19] o lagrangianos relativistas[20, 21].

Sin embargo, estos últimos métodos no están exentos de limitaciones. Por un lado, los códigos EDF existentes en la actualidad están muy ajustados y optimizados para usarse con un tipo concreto de interacción y no permiten mucha flexibilidad para cambiar dicha interacción. Además, en algunos casos se tiene dificultad para incorporar grados de libertad que supongan rupturas de simetrías subyacentes a las funciones de onda de campo medio. A modo de ejemplo, la ruptura de la inversión temporal –ya sea con el mecanismo de bloqueo[22] y/o *cranking*[23]– permite la descripción adecuada de núcleos impares y de excitaciones colectivas y monoparticulares con el mismo formalismo, y, la mezcla de protones y neutrones en las transformaciones HFB permite el estudio del apareamiento protón-neutrón (isoescalar e isovectorial), entre otras bondades.

De este modo, el proyecto TAURUS pretende ir más allá de las limitaciones impuestas en dichas aplicaciones. El conjunto (*suite*) de códigos informáticos que lo componen, escritos en FORTRAN 2003, son capaces de resolver el problema nuclear de muchos cuerpos cuántico usando el método PGCM con interacciones genéricas a dos cuerpos y con funciones de onda de tipo HFB generales (salvo la condición de que la transformación HFB sea real). Además, emplea una base de oscilador armónico esférico con espín-órbita como base de partícula independiente y puede acomodar un número arbitrario de capas de oscilador, si bien el incremento exponencial en el tiempo de cálculo con el número de capas limita este número de manera práctica.

## 1.2. Estructura de la memoria

Esta memoria de tesis está estructurada del siguiente modo: En el Capítulo 2 se exponen someramente algunos de los grandes modelos de estructura nuclear que han ido sofisticándose desde mediados del siglo anterior, donde residen con los conceptos de fondo que sustentan el formalismo teórico de este trabajo. Además, se hará mención a las distintas interacciones nucleares que a día de hoy se utilizan, junto con las principales técnicas para su obtención.

En el Capítulo 3 se expone la teoría asociada al formalismo PGCM, desde la obtención de los estados de cuasipartícula con la transformación HFB hasta la forma en la que se realiza la mezcla de configuraciones para la obtención de la función de ondas nuclear aproximada. Dado que existen fuentes bibliográficas al respecto, se hará énfasis en las expresiones relevantes para la implementación numérica de las distintas herramientas, dejando al lector –en las correspondientes referencias– aquellos manuales de estructura nuclear que exponen minuciosamente los conceptos involucrados.

Los Capítulos 4 y 5 se dedican a la comparación de las diferentes aproximaciones variacionales PGCM con los resultados exactos, dados por los cálculos del modelo de capas. Esto supone una puesta a prueba no solo del formalismo, sino de la fiabilidad de los códigos desarrollados a lo largo del periodo de investigación. Para dicha comparación se emplearán las mismas interacciones realistas que se emplean en la resolución exacta de los problemas de estructura. Además, se hará especial énfasis en el papel de las simetrías consideradas en las funciones de onda, así como en la relevancia de los grados de libertad (colectivos y no colectivos) habitualmente explorados en la literatura.

El Capítulo 6 se centra en las correlaciones de apareamiento y su efecto en la descripción de las probabilidades de transición  $\beta$  y  $\beta\beta$  sin neutrinos. Además, se profundizará en el problema de la competición entre los canales de acoplamiento protón-neutrón isovectorial e isoescalar.

Por último, el Capítulo 7 servirá como cierre de la memoria de tesis, exponiendo las principales conclusiones y algunas líneas de trabajo futuras. Se deja además, para los dos apéndices incluidos, las expresiones y desarrollos necesarios para la implementación numérica de las transiciones electromagnéticas (Apéndice A),  $\beta$  y

$\beta\beta$  sin neutrinos (Apéndice B).

---

# Capítulo 2

## Modelos nucleares

### 2.1. Una breve introducción histórica

El núcleo atómico, como se ha mencionado en la introducción, es un sistema altamente complejo en el que entran en juego multitud de factores. La presencia de tres de las cuatro fuerzas fundamentales, el tratamiento mecano-cuántico y el número de partículas involucrado, por mencionar algunas dificultades, ha hecho que desde hace más de un siglo los modelos teóricos hayan evolucionando, perfeccionándose y, en algunos casos, ramificarse para poder describir los distintos fenómenos asociados a la física nuclear.

Por un lado, la interacción nucleón-nucleón no está del todo clara. Si bien es cierto que la teoría QCD ha ayudado a entender la naturaleza de dicha interacción, a día de hoy estamos lejos de poder describir toda la riqueza y variedad de la carta de núcleos en términos de las partículas elementales que componen los nucleones.

Por otro lado, revisando los distintos modelos nucleares que se han desarrollado hasta la fecha, podemos ver la disparidad de propiedades que cada uno de ellos puede describir. Desde el punto de vista macroscópico, ya en 1930 podemos encontrar los primeros modelos nucleares[24], en los que se entendía el núcleo como una gota de agua formada formada por protones y electrones. Esta idea fue depurándose hasta lo que conocemos hoy como el modelo de gota líquida (*Liquid Drop Model*), el cual es capaz de describir con cierta precisión las masas y energías de enlace de los distintos núclidos con la célebre fórmula semiempírica de masas de Bethe y Weizsäcker[25].



Gracias a las distintas correcciones de este último modelo, se pudo entender las deformaciones de masa, estados rotacionales y vibracionales e incluso se pudo explicar en gran medida el fenómeno de la fisión nuclear[26, 27]. No obstante todas estas propiedades del núcleo no dejan de ser macroscópicas, esto es, entendido el núcleo como un todo colectivo, sin prestar atención a lo que ocurre con cada nucleón de forma individual. De este modo, a medida que la experimentación en física nuclear crecía, se vio la necesidad de considerar el comportamiento individual de los nucleones, por lo que comenzarían a desarrollarse los primeros modelos de estructura nuclear microscópicos. El primero de estos fue la aplicación de la teoría del gas de Fermi[28], originalmente elaborada para átomos multielectrónicos. Años más tarde, a mediados de siglo XX, se asentarán las bases de los modelos en los que se enmarca esta tesis, esto es, el modelo de capas nuclear y la aproximación de campo medio.

## 2.2. Modelo de capas

Con el paso del tiempo y el desarrollo de mejores técnicas experimentales, cada vez se ponía más de manifiesto la importancia de poder describir microscópicamente el núcleo atómico. A finales de la década de los 40, Maria Goeppert-Mayer y en paralelo Otto Haxel, J. Hans D. Jensen, y Hans E. Suess dan por primera vez una explicación satisfactoria a que ciertos núcleos -en particular con 2, 8, 2, 8, 2, 8 o 14 protones o neutrones- presentaran una mayor estabilidad[29–31]. Así, y tomando como referencia el llenado de órbitas electrónicas en el modelo atómico, se entendió que también protones y neutrones se organizaban en capas de tal modo que, al cerrarse una de estas, el núcleo en cuestión era más estable que los núcleos vecinos. A los núcleos que cerraban capas en esos números se les conoce como mágicos, y si cierran capas en protones y neutrones, doblemente mágicos.

Fundamentalmente, el modelo de capas se basa en los siguientes principios. En primer lugar, para construir las funciones de onda nucleares de muchos cuerpos se toman, como punto de partida, las funciones de onda monoparticulares, teniendo en cuenta que los nucleones interactúan únicamente con un potencial promedio de tipo oscilador armónico junto con una fuerte interacción espín-órbita[10]:

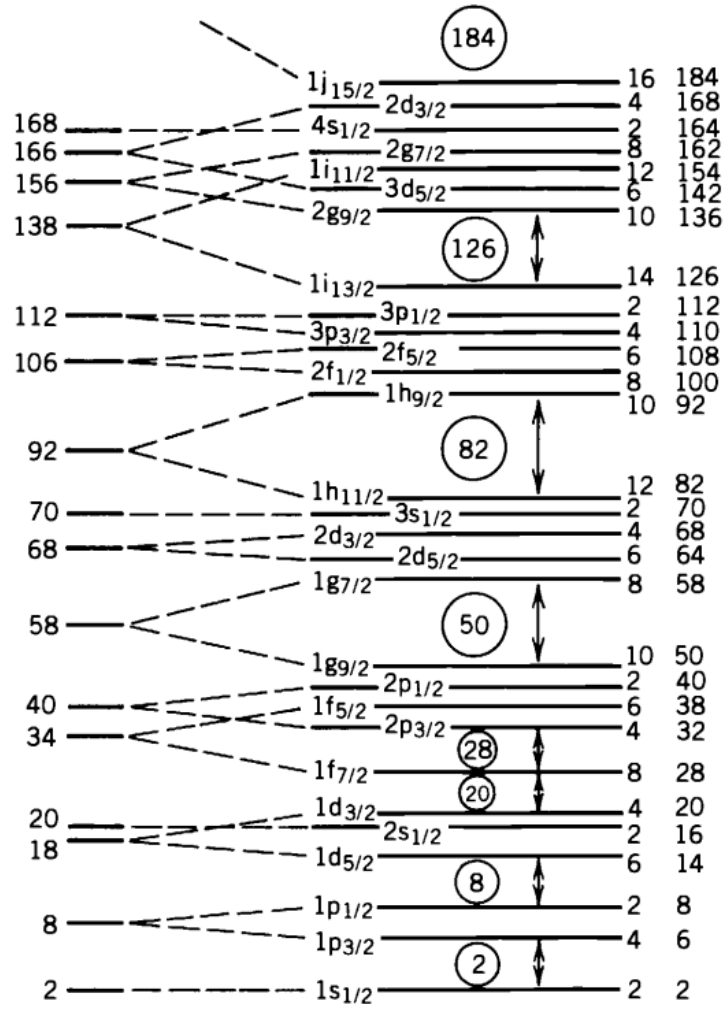


Figura 2.1: Distintas órbitas dadas por el modelo de capas nuclear. Los números contenidos en círculos indican los mágicos asociados a la expresión (2.1). Extraído de [32].

$$U(r) = \frac{1}{2}\hbar\omega r^2 + D\vec{l}^2 + C\vec{l} \cdot \vec{s} \quad (2.1)$$

Así, la función de onda del núcleo, considerando cada uno de sus nucleones, es el producto de estas funciones de onda individuales de los protones y neutrones que van llenando las distintas capas asociadas a dicho potencial, es decir, un determinante de Slater, el cual se emplea para diagonalizar el hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear.

Aunque este proceso proporciona la solución exacta al problema, por desgracia, esta es inalcanzable cuando tenemos un número elevado de partículas. En efecto, la combinatoria asociada al cálculo de los determinantes de Slater hace que el número de estados de la base pueda llegar a ser verdaderamente grande, de modo que el tiempo de cálculo requerido por los códigos SM se presenta como una limitación del método. Este hecho se pone de manifiesto más explícitamente en cálculos el método denominado modelo de capas sin *core* (*No-Core Shell Model*, NCSM) debido a su enorme coste computacional, solamente se puede usar sin aproximaciones para núcleos muy ligeros[33].

Considerando lo anterior, es habitual definir el espacio de configuración para distintas regiones de núcleos, delimitadas por dos núcleos doblemente mágicos. De este modo, las interacciones efectivas utilizadas en este método están ajustadas para describir correctamente los núcleos dentro de dichas regiones. A modo de ejemplo, la interacción USD[34] que se emplea en este trabajo, considera un *core* congelado dado por el  $^{16}\text{O}$  y permite la descripción de las capas  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$ ,  $0d_{3/2}$  de protones y neutrones, esto es, hasta la descripción del  $^{40}\text{Ca}$ , que también es doblemente mágico.

Por último, la implementación del modelo de capas con interacción solamente puede realizarse si tenemos a nuestra disposición de herramientas de cálculo adecuadas para diagonalizar las matrices gigantescas que aparecen de manera inherente a este método. Existen herramientas de software desarrolladas por distintos grupos de investigación que permiten la extracción de autovalores y autovectores de las matrices hamiltonianas del modelo de capas como ANTOINE y NATHAN (colaboración Estrasburgo-Madrid)[10, 35, 36], OXBASH[37] (desarrollado principalmente en Michigan) o BiGSTICK[38] (desarrollado en California), por poner algunos ejemplos.

Como se ha podido ver, la dependencia en la interacción y la necesidad de reducir el coste computacional hace que este modelo no sea tampoco universal y, en algunas condiciones, ni siquiera aplicable.

### 2.3. Métodos de campo medio autoconsistentes

Dada la dificultad descriptiva que presenta el método anterior, se ve necesario realizar una serie de aproximaciones que nos permitan, aunque perdiendo precisión,

poder tratar con sistemas de muchas partículas.

La mayor simplificación del problema, conocida como la aproximación de campo medio<sup>1</sup>, asume que cada nucleón se mueve de forma independiente, inmerso en un potencial promedio producido por el resto de nucleones. Por tanto, las interacciones a dos cuerpos deben ser transformadas a potenciales a un solo cuerpo, esto es,

$$V(1, \dots, A) = \sum_{i < j=1}^A V_{i,j} \approx \sum_{i=1}^A V_i \quad (2.2)$$

cuya expresión del potencial puede ser la del oscilador armónico, Woods-Saxon o expresiones autoconsistentes como se emplean en Hartree-Fock o Hartree-Fock-Bogoliubov. De este modo, asumiendo que el hamiltoniano de muchos cuerpos es la suma de hamiltonianos a un cuerpo, y la función de onda es el determinante de Slater en la base del oscilador armónico  $|nlsjm\rangle$ , la ecuación de Schrödinger tomaría la forma

$$\left\{ \sum_{i=1}^A h_i \right\} \Psi = \left\{ \sum_{i=1}^A -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i + V_i \right\} \Psi = E\Psi \quad (2.3)$$

lo que nos permite resolver la ecuación de autovalores trabajando en un esquema de partícula independiente.

El método SCMF, por tanto, reside en resolver la expresión anterior mediante el principio variacional, esto es, utilizar funciones de onda prueba que dependan de los parámetros que definen la transformación correspondiente (HF, BCS, etc.). De este modo, podemos obtener de manera aproximada la función de onda y la energía asociada al estado fundamental del sistema de muchos cuerpos.

El principio variacional se sustenta en lo siguiente[40]. Por un lado, la equivalencia entre la ecuación de Schrödinger,

$$\hat{H} |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle \quad (2.4)$$

y la ecuación variacional

---

<sup>1</sup>En realidad, los métodos de campo medio se han utilizado en más ramas de la física, como en los sistemas multielectrónicos en física atómica o de la materia condensada[39].

$$\delta E [|\Psi\rangle] = 0 \quad (2.5)$$

donde

$$E [|\Psi\rangle] = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \quad (2.6)$$

por lo que si ahora utilizamos una función de onda prueba,  $\phi$ , el teorema de Ritz[16] nos asegura que la energía del estado fundamental será siempre mayor o igual a la energía dada por la diagonalización exacta del hamiltoniano,  $E_0$ ,

$$E [|\phi\rangle] = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \geq E_0 \quad (2.7)$$

donde la igualdad se cumple si la función de onda prueba coincide con la función de onda exacta del estado fundamental.

En el caso de utilizar funciones de onda tipo producto, como los determinantes de Slater, las herramientas anteriores nos llevan a la obtención de las ecuaciones de Hartree-Fock. Sin embargo, este tipo de funciones de onda restringen bastante el espacio variacional, pues no se incluyen todas las correlaciones entre los fermiones que componen el sistema. Para aumentar el espacio variacional, se permite a la función de onda romper algunas simetrías, tales como el número de partículas, paridad, invariancia bajo rotaciones, etc. lo que permite describir fenómenos tanto colectivos como no colectivos que antes no era posible[41]:

1. En el caso de trabajar con la aproximación HFB, al pasar de una descripción de partícula independiente a estados de cuasipartículas, estamos rompiendo el número de partículas, por lo que aparecerán ciertas correlaciones de apareamiento que antes no era posible tener en cuenta.
2. En el caso de trabajar con funciones de onda deformadas, estamos rompiendo la simetría de momento angular, por lo que podremos describir espectros rotacionales o deformaciones.

En la actualidad se pueden encontrar diversos códigos que utilizan la aproximación HF para la obtención de superficies de energía en función de la deformación

para poder interpretar los resultados exactos dados por el cálculo del modelo de capas[42, 43]

Una vez se obtiene la función de onda que minimiza la energía del estado fundamental, se pueden incluir todavía más las correlaciones con las técnicas BMFA, por lo que el método SCMF sirve como punto de partida para cálculos más sofisticados, como la restauración de simetrías y el método de la coordenada generadora, cuyos principios y expresiones se desarrollan en el siguiente capítulo.

## 2.4. El problema de la interacción nuclear

Los métodos anteriormente citados han sido ampliamente utilizados en cálculos de estructura nuclear, si bien hay disparidad de resultados dada la variedad de interacciones. Cabe aquí, por tanto, hacer un breve resumen con los principales conceptos involucrados a la hora de obtener las distintas interacciones nucleares. En la Fig. 2.2 se muestra un diagrama resumen de las principales técnicas en función de la masa de los sistemas que se tratan de describir.

Para tratar con sistemas de pocos cuerpos (tritio, deuterón, etc.), el punto de partida de la interacción es una forma general de los potenciales, que proviene de los modelos de intercambio de mesones de Yukawa[44]. Actualmente existen multitud de potenciales[45] cuyos parámetros se ajustan, entre otros, a datos de experimentos de dispersión. Si bien, para poder reproducir adecuadamente los espectros de núcleos muy ligeros, es habitual incluir *ad-hoc* términos a tres cuerpos[46, 47].

Otra posibilidad para este mismo tipo de sistemas es partir de los –ya mencionados– métodos *ab initio*. Estos es, usando lagrangianos efectivos basados en la teoría de campos efectiva quirral[48], donde los grados de libertad son los nucleones que se intercambian. A baja energía de excitación, se pueden derivar potenciales nucleares que tienen una jerarquía en el número de cuerpos que intervienen. Así, los términos más importantes son las interacciones a dos cuerpos, después a tres cuerpos, etc. En este caso, las constantes de acoplamiento de la teoría también se ajustan para reproducir los datos experimentales de pocos cuerpos (desfasajes en experimentos de dispersión nucleón-nucleón o propiedades de núcleos ligeros como el deuterón, tritón o  ${}^3\text{He}$ )[49, 50].

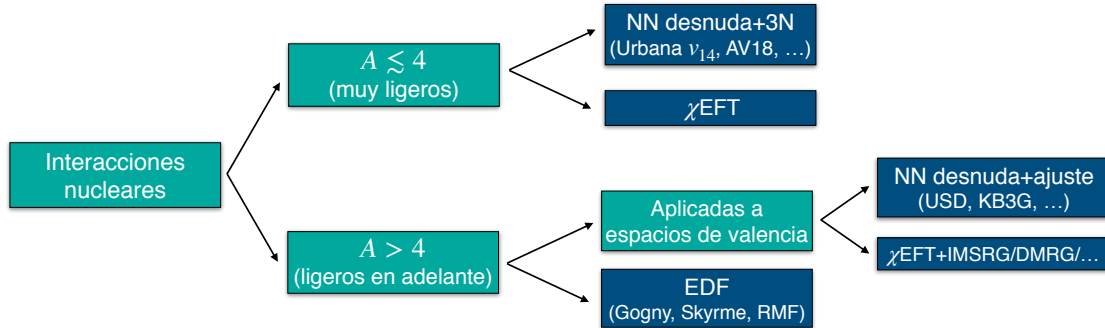


Figura 2.2: Diagrama esquemático de los principales métodos de obtención de la interacción nuclear en función del número de nucleones involucrados.

Ahora bien, para núcleos con un mayor número de nucleones estas técnicas presentan ciertas limitaciones, siendo el coste computacional una de las principales. De este modo, en el caso de tratar sistemas más complejos, pueden distinguirse también dos formas de obtener la interacción nuclear.

Si las interacciones son adaptadas a los espacios de valencia del modelo de capas, una primera posibilidad es partir de interacciones de tipo *ab initio* que se transforman mediante técnicas como la de la matriz G[51]. En el proceso, sin embargo, aparecen componentes fenomenológicas como las energías de partícula independiente y/o constantes que escalen la intensidad de los elementos de matriz[52]. Además, para evitar las divergencias debidas a la fuerte repulsión a cortas distancias, se emplean técnicas de renormalización, tales como el grupo de renormalización de la matriz densidad (*Density-Matrix Renormalization Group*, DMRG)[53] o el grupo de renormalización de similitud en el medio (*In-Medium Similarity Renormalization Group*, IMSRG)[54, 55], de los más prometedores por los resultados que está obteniendo. Este tipo de interacciones son habituales en cálculos NCSM o aquellos que utilizan funciones de Green con métodos Monte Carlo (*Green's Function Monte Carlo*, GFMC)[56, 57].

De partir de la propia interacción desnuda NN y considerar los datos experimentales disponibles para distintos núcleos (masas y radios nucleares, entre otros) en una misma capa, se habla entonces de interacciones efectivas realistas, válidas para

distintos regímenes dentro de la carta de núcleos[58–60].

Una generalización de este último tipo de interacciones consiste en abandonar la idea de la existencia de un hamiltoniano nuclear subyacente y proponer energías que dependan funcionalmente de la densidad nuclear (*Energy Density Functionals*, EDF). Ejemplos de interacciones efectivas fenomenológicas son las basadas en la fuerza de Gogny (Ref. [19] y referencias incluidas), de Skyrme[11, 61] o la aproximación de campo medio relativista[62] (*Relativistic Mean Field*, RMF). Así, la bondad de las interacciones fenomenológicas reside en su validez para toda la carta de núcleos, sin embargo, los parámetros a ajustar no dejan de ser una “caja negra” cuyo significado físico es difícil de interpretar.

Gracias a la versatilidad del código TAURUS, es posible utilizar, tanto interacciones efectivas basadas en QCD para cálculos sin *core* como realistas, en el que se tenga en cuenta la separación de la parte inerte del espacio de valencia[63]. Sin embargo, las empleadas en este trabajo de tesis se enmarcan precisamente en este último conjunto. La justificación es doble. Teniendo en cuenta los recursos computacionales accesibles para este trabajo, es conveniente trabajar con espacios de valencia reducidos para reducir notablemente el tiempo de cálculo. Además, estas interacciones pueden ser fácilmente utilizadas en el código de modelo de capas ANTOINE, el cual incluye un repositorio propio dentro de sus librerías. Así, se han podido comparar los resultados obtenidos con el esquema PGCM y la solución exacta y someter a prueba la fiabilidad de las distintas aproximaciones variacionales.





---

# Capítulo 3

## PGCM con la suite TAURUS

### 3.1. Introducción

Para poder desarrollar cada uno de los pasos del esquema PGCM, en primer lugar es necesario asentar algunas bases sobre las que se construye este formalismo.

En primer lugar, la base que genera el espacio de configuración son el conjunto de estados de partícula independiente asociados al oscilador armónico. Dichos estados, por tanto, dependen de los operadores de creación y aniquilación fermiónicos  $\{\hat{c}_a^\dagger, \hat{c}_a\}$  respectivamente, caracterizados por su número cuántico principal,  $n_a$ ; momento angular orbital,  $l_a$ ; espín,  $s_a = 1/2$ ; momento angular total,  $j_a$  y su tercera componente  $m_{j_a}$ : isospin,  $t_a = 1/2$  y su tercera componente,  $m_{t_a} = \pm 1/2$ . Siendo este último número cuántico el que determina la especie del nucleón, esto es, protones para  $m_{t_a} = -1/2$  y neutrones para  $m_{t_a} = +1/2$ , si bien esta elección es arbitraria. De este modo, y por simplificar la notación se utilizará la abreviación  $a \equiv (n_a, l_a, s_a, j_a, m_{j_a}, t_a, m_{t_a})$ .

En esta base, el hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear que incluye términos a uno y dos cuerpos<sup>1</sup> viene dado por la expresión

$$\hat{H} = \sum_{ab} t_{ab} \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_b + \frac{1}{4} \sum_{abcd} \bar{v}_{abcd} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_b^\dagger \hat{c}_d \hat{c}_c \quad (3.1)$$

---

<sup>1</sup>Aunque se podrían incluir términos a más cuerpos, los principales y que han demostrado tener una gran capacidad descriptiva son los aquí incluidos.

donde  $t_{ab} \equiv \langle a|\hat{t}|b\rangle$  son los elementos de matriz a un cuerpo de la energía cinética y  $\bar{v}_{abcd} \equiv \langle ab|\hat{V}|cd\rangle$  son los elementos de matriz antisimetrizados a dos cuerpos, esto es,  $v_{abcd} - v_{abdc}$ . Ambos elementos de matriz (a uno y dos cuerpos), además, están asociados tanto al espacio de valencia escogido como a la interacción empleada.

En espacios de valencia reducidos, la ecuación de muchos cuerpos de Schrödinger puede resolverse exactamente para un número dado de protones y neutrones de valencia. En efecto, sea  $Z_v$  ( $N_v$ ) el número de protones (neutrones) de valencia y sea  $\Omega_{\pi(\nu)} = \sum_a 2j_a + 1$  el número total de estados de partícula independiente de protones (neutrones), si se construye la base dada por los  $\binom{\Omega_{\pi}}{Z_v} \cdot \binom{\Omega_{\nu}}{N_v}$  determinantes de Slater, el problema de autovectores y autovectores puede resolverse mediante la diagonalización del operador (3.1) en dicha base.

Como ya se ha mencionado, este método se hace difícil –y en algunos casos imposible– de llevar a cabo cuando el número de configuraciones, asociado al número de partículas activas y el tamaño del espacio de valencia, es relativamente alto. De este modo, la alternativa que se explora en este trabajo de tesis es recurrir a las soluciones aproximadas dadas por el método variacional PGCM.

En esta aproximación, ahora la función de ondas de muchos cuerpos nuclear vendrá dada por la combinación lineal de funciones de onda de campo medio, llamados estados intrínsecos, proyectados a buenos números cuánticos. Esto es[11, 16]:

$$|\Psi_{\sigma}^{JMNZ\pi}\rangle = \sum_{qK} f_{\sigma;qK}^{JMNZ\pi} \hat{P}_{MK}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z \hat{P}^{\pi} |\phi(q)\rangle \quad (3.2)$$

donde  $\{|\phi(q)\rangle\}$  son los mencionados estados intrínsecos, obtenidos mediante la aplicación del principio variacional,  $\hat{P}^{N(Z)}$  es el proyector a buen número de neutrones (protones),  $\hat{P}_{MK}^J$  es el proyector a momento angular y  $\hat{P}^{\pi}$  es el proyector a paridad. Además, los coeficientes  $f_{\sigma;qK}^{JMNZ\pi}$  se obtienen con una segunda aplicación del método variacional resolviendo la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin (HWG). Además, un aspecto fundamental de este formalismo es la dependencia en ciertos de grados de libertad internos,  $q$ , que cada uno de los estados intrínsecos de la mezcla describe en valor medio.

Este ansatz, por tanto, desglosa de forma natural el método PGCM en tres grandes bloques asociados a los tres pasos necesarios para la construcción de dicha función de ondas de muchos cuerpos:

1. Obtención de los estados intrínsecos. En este trabajo se asumen que son estados de cuasipartículas dadas por la transformación HFB, ya que es la función de ondas de campo medio más general que se puede construir. Partiendo de una función de onda prueba (semilla), se variará de tal modo que minimice el hamiltoniano y satisfaga diferentes valores medios en los distintos grados de libertad mediante el método del gradiente y la imposición de ligaduras. La función de ondas resultante, en principio no presentará las simetrías propias del hamiltoniano, si bien es posible minimizar funciones de onda proyectadas a buenos número cuánticos. A este último método se le conoce habitualmente como variación después de la proyección (*Variation After Projection*, VAP). El formalismo teórico asociado a estos métodos se desarrollará explícitamente en la sección 3.2.
2. Proyección a buenos números cuánticos. Una vez hallado el estado intrínseco deseado es necesario restaurar las simetrías rotas en el paso anterior. Así, se deberá proyectar simultáneamente –en este trabajo– a buen número de partículas, momento angular y, si es necesario, a paridad. A este procedimiento se le conoce como proyección después de la variación (*Projection After Variation*, PAV). Aunque se hayan obtenidos los estados del paso anterior mediante el método VAP, aún será necesario proyectar de nuevo para que la función de ondas satisfaga simultáneamente todas las simetrías requeridas. La sección 3.3 se dedica enteramente a este formalismo y su implementación numérica.
3. Obtención de los coeficientes de la combinación lineal de la función de ondas PGCM. Este procedimiento implica una segunda aplicación del principio variacional, siendo los parámetros variacionales los coeficientes  $f_{\sigma;qK}^{JMNZ\pi}$  de la expresión (3.71). Para esto, es necesario resolver la ecuación HWG[16, 64, 65]

$$\sum_{q'K'} (\mathcal{H}_{qKq'K'}^{\Gamma} - E_{\sigma}^{\Gamma} \mathcal{N}_{qKq'K'}^{\Gamma}) f_{\sigma;qK}^{\Gamma} = 0 \quad (3.3)$$

siendo  $\Gamma \equiv JMNZ\pi$ ,  $\mathcal{H}$  el valor medio del hamiltoniano entre los estados intrínsecos proyectados y  $\mathcal{N}$  el valor de la norma del propio solape, esto es

$$\mathcal{H}_{qKq'K'}^\Gamma = \langle \phi(q) | \hat{H} P_{KK'}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z \hat{P}^\pi | \phi(q') \rangle \quad (3.4)$$

$$\mathcal{N}_{qKq'K'}^\Gamma = \langle \phi(q) | P_{KK'}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z \hat{P}^\pi | \phi(q') \rangle \quad (3.5)$$

donde ya se han considerado las propiedades de los distintos proyectores para simplificar las expresiones anteriores. Dado que el conjunto de estados intrínsecos, en principio, no son ortogonales entre sí, el problema de autovalores y autovectores deberá resolverse transformando dicho conjunto a una base ortogonal. En la sección 3.4 se desarrollan con más detalle los aspectos teóricos y numéricos de este paso.

Una vez obtenida la función de ondas de muchos cuerpos y el espectro de energías asociado, se podrá analizar la colectividad de los distintos grados de libertad explorados e incluso hallar solapes de diferentes observables entre funciones de onda PGCM, siendo los más habituales las probabilidades de transición EM o elementos de matriz nucleares de las desintegraciones  $\beta$  o  $0\nu\beta\beta$ .

## 3.2. Construcción de los estados intrínsecos

### 3.2.1. Función de onda HFB: estructura y simetrías auto-consistentes

El método HFB –generalización de la aproximación de campo medio Hartree-Fock y de la teoría BCS[66]– es un método variacional cuyo espacio variacional está formado por las funciones de onda de tipo producto monoparticulares lo más generales posible, es decir, por funciones de onda de campo medio. En particular, esta función de onda se considera vacío de un conjunto de operadores fermiónicos, tal que

$$\hat{\beta}_k |\phi\rangle = 0, \quad \forall k = 1, \dots, M \quad (3.6)$$

siendo  $M$  la dimensión total del espacio de configuración y  $\hat{\beta}$  están definidos de tal modo que son combinación lineal de los operadores de creación y destrucción

de estados monoparticulares. Esta transformación, conocida como transformación de Bogoliubov-Valatin[67, 68], viene dada en el formalismo de segunda cuantización por la expresión

$$\hat{\beta}_k^\dagger = \sum_l U_{lk} \hat{c}_l^\dagger + V_{lk} \hat{c}_l \quad (3.7)$$

donde los índices  $l, k$  van desde 1 hasta la dimensión del espacio de configuración de nuestro sistema y los operadores  $\hat{c}_l^\dagger$  y  $\hat{c}_l$  son los tradicionales operadores fermiónicos, que crean y destruyen partículas asociadas a un determinado estado de la base de trabajo. En TAURUS, como ya se ha mencionado, la base es la del oscilador armónico esférico, definida por los números cuánticos  $(n, l, s, j, m_j, t, m_t)$ .

Además, los nuevos operadores,  $\hat{\beta}^\dagger$  y su complejo conjugado  $\hat{\beta}$ , llamados de creación y aniquilación de cuasipartículas-, satisfacen las mismas reglas de anticonmutación que los operadores de partículas, esto es,

$$\{\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j\} = \{\hat{\beta}_i^\dagger, \hat{\beta}_j^\dagger\} = 0 \quad (3.8a)$$

$$\{\hat{\beta}_i, \hat{\beta}_j^\dagger\} = \delta_{ij} \quad (3.8b)$$

Uno de los aspectos fundamentales de la transformación (3.7) reside en la consecuente ruptura espontánea de la simetría del número de partículas. Este hecho permite la inclusión de un mayor número de correlaciones en la función de onda nuclear preservando la estructura de tipo producto de estados monoparticulares.

$$|\phi\rangle = |\phi_\pi\rangle \otimes |\phi_\nu\rangle \quad (3.9)$$

Desde el punto de vista variacional, esta transformación permite explorar un espacio mayor. En efecto, bajo ciertas condiciones (como un espacio de valencia y número de partículas reducidos) será posible encontrar la función de onda que describa exactamente el estado fundamental del sistema dentro del espacio variacional explorado. Por tanto, la estructura y simetrías de la función de onda HFB toman un papel de vital importancia a la hora de encontrar los estados intrínsecos óptimos.

Si bien este método tiene un precio. Por un lado, será necesario restaurar dichas simetrías con las técnicas habituales de proyección (que se describirán más adelante); por otro, se requiere más tiempo de cálculo para encontrar las soluciones óptimas a

mayor generalidad en la función de onda. Así, si la interacción lo favorece, es habitual imponer algunas simetrías autoconsistentes en la transformación HFB que simplifican significativamente el proceso, permitiendo –aún así– una buena descripción de los diferentes sistemas.

Teniendo en cuenta que la función de onda HFB se construye con la actuación de los operadores  $\hat{\beta}$  sobre el estado vacío  $|-\rangle$ , según

$$|\phi\rangle = \prod_k \hat{\beta}_k |-\rangle \quad \forall k = 1, \dots, M \quad (3.10)$$

entonces, sus simetrías vendrán dadas por las impuestas en las matrices  $U, V$  de la transformación de Bogoliubov.

Cabe destacar algunas de ellas: En primer lugar, los elementos de matriz  $U_{ij}$  y  $V_{ij}$  se fijan reales. Si bien en la literatura se pueden encontrar implementaciones con la generalización compleja[69], dado que las energías son reales, esta limitación del espacio variacional parece más que razonable y computacionalmente eficiente.

En segundo lugar, es habitual construir la función de onda con una estructura de bloques separados en protones y neutrones. Para preservar esta simetría, no se permitirá la mezcla de índices en ambos  $m_t$ . Así, las matrices de la transformación HFB presentarán la siguiente forma:

$$U = \begin{pmatrix} U_\pi & 0 \\ 0 & U_\nu \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} V_\pi & 0 \\ 0 & V_\nu \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

En el caso de querer permitir la mezcla de especies de nucleones, bastará con incluir términos en los bloques no diagonales de las matrices anteriores.

En relación con la simetría rotacional, también es posible la construcción de estados intrínsecos que satisfagan axialidad, esto es, que sean autoestado del operador  $\hat{J}_z$ , tal que  $\hat{J}_z |\phi\rangle = k |\phi\rangle$  con  $k = 0$ . Además, como caso particular, se podrá también imponer la simetría esférica. En el caso de no considerar estas simetrías el estado será generalmente triaxial.

Por último, también se puede considerar la simetría bajo reflexiones espaciales. Esto tomará especial relevancia en los cálculos que incluyan mezcla de capas con diferente paridad (dada por el número cuántico orbital,  $l$ )

Cabe mencionar que, aunque se impongan las simetrías anteriores en la función de onda prueba, el estado HFB obtenido puede que no las presente, dada la dependencia en el proceso de minimización así como en la inclusión de ligaduras que se expone en el siguiente apartado.

La construcción de las matrices anteriores también toma un papel crucial a la hora de poder describir estados con diferente paridad de número de protones o neutrones[70, 71], asociados a los sistemas par-par, par-impar o impar-impar. Aunque existen métodos que permiten describir de forma aproximada el estado fundamental y conjunto de estados excitados de los núcleos de masa impar, tales como la adición perturbativa de nucleones (*perturbative nucleon addition*)[72] o la aproximación de igual llenado (*equal filling approximation*)[73], estos no permiten la construcción explícita de la función de onda nuclear. En este trabajo, no obstante, se puede alterar la estructura de la transformación HFB para que satisfaga la paridad del número de partículas adecuada.

En efecto, dado que un núcleo con número impar de protones o neutrones se obtiene según la expresión

$$|\phi_{e-o}\rangle = \hat{\beta}_1^+ |\phi_{e-e}\rangle \quad (3.12)$$

donde  $e - e$  indica que la función de onda describe un sistema par-par (*even-even*) y  $e - o$  par-impar (*even-odd*).

Así, este nuevo estado será el vacío del conjunto de operadores  $(\tilde{\beta}_1, \tilde{\beta}_2, \tilde{\beta}_3 \dots)$  siendo  $\tilde{\beta}_1$  el operador que crea el estado de cuasipartícula y el resto, los operadores  $\hat{\beta}_2, \hat{\beta}_3 \dots$  asociados a un vacío con todos los niveles llenos apareados[16].

La forma en la que se obtiene el conjunto de operadores  $\tilde{\beta}$  será reemplazar el operador  $\hat{\beta}_1$ , con el correspondiente  $\hat{\beta}_1^+$ , lo que se traduce en reemplazar la columna asociada de la matriz  $U$  por la correspondiente de  $V$ . A este procedimiento se le conoce como bloqueo (*blocking*) pues, en realidad, solo estamos evitando que haya acoplamiento de pares  $k\bar{k}$  (siendo  $\bar{k}$  el estado reverso en el tiempo de  $k$ ) imponiendo que un estado se encuentre totalmente ocupado, mientras que el otro esté totalmente desocupado.

Siguiendo con esta estrategia, si queremos describir un núcleo impar-impar, será necesario bloquear dos niveles, de protones y neutrones, simultáneamente. Esto es equivalente a decir que dicho estado será una excitación de dos cuasipartículas del



tipo  $|\phi_{o-o}\rangle = \beta_1^+ \beta_2^+ |\phi_{e-e}\rangle$ . Y aquí es donde surge una de las principales dificultades del método. En efecto, para que el estado realmente describa este tipo de sistemas deberá presentar el número paridad global positivo.

La forma en la que se abordan este tipo de problemas y las diferencias entre las principales semillas se expondrán en el capítulo posterior, dedicado a los tres posibles casos par-par, par-impar e impar-impar. Además, se analizará también el efecto de la inclusión de la mezcla  $pn$  en dichas funciones de onda bloqueadas.

### 3.2.2. Imposición de ligaduras

Como ya se ha mencionado, la propia aproximación de cuasipartícula rompe la simetría del número de partículas, por lo que la función de onda HFB, en general, no será autoestado de los operadores  $\hat{N}$  y  $\hat{Z}$ , o en general  $\hat{N}_\tau$ . Así, es habitual imponer que dicho estado satisfaga, al menos en valor promedio, el número de partículas correspondiente al núcleo objetivo, esto es

$$N_{0,\tau} = \langle \phi | \hat{N}_\tau | \phi \rangle \quad (3.13)$$

siendo  $N_{0,\tau}$  el número de protones o neutrones que se desea describir. Esta misma estrategia se puede generalizar para cualquier operador  $\hat{O}_i$  de tal modo que la función de onda HFB esté restringida al conjunto de ligaduras (*constraints*) que se desee.

Entre otras ligaduras se encuentran los operadores de deformaciones de masa cuadrupolares  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  con  $\lambda = 1, 2, 3, 4$ , las amplitudes de apareamiento  $pp$ ,  $nn$ ,  $pn$  (con acoplamiento a isoespín  $T = 0, 1$ ), y los operadores de momento angular  $\hat{J}_x$ ,  $\hat{J}_y$  y  $\hat{J}_z$ .

Las expresiones de los primeros operadores vienen dados por:

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi) \quad (3.14)$$

donde  $Y_{\lambda\mu}(\theta, \varphi)$  son los armónicos esféricos de grado  $\lambda$  y orden  $\mu$ . Así, se pueden ex-

plorar las deformaciones cuadrupolares ( $\lambda = 2$ ) imponiendo las siguientes ligaduras:

$$q_{20} = \langle \phi | \hat{Q}_{20} | \phi \rangle \quad (3.15)$$

$$q_{21} = \langle \phi | \hat{Q}_{21} - |\hat{Q}_{2-1}| \phi \rangle \quad (3.16)$$

$$q_{22} = \langle \phi | \hat{Q}_{22} + \hat{Q}_{2-2} | \phi \rangle \quad (3.17)$$

si bien es habitual explorar dicho grado de libertad en términos de los parámetros de deformación[16, 74]  $(\beta_2, \gamma)$ , definidos por

$$q_{20} = C\beta_2 \cos \gamma, \quad (3.18)$$

$$q_{22} = \sqrt{2}C\beta_2 \sin \gamma, \quad (3.19)$$

donde  $C = \frac{3r_0^2 A^{5/3}}{8\pi}$ ,  $r_0 = 1,2$  fm y  $A$  es el número másico total, que incluye los nucleones del *core* inerte y del espacio de valencia. En este caso, se suele imponer además la condición  $q_{21} = 0$ .

Las correlaciones de apareamiento también se pueden explorar a nivel HFB restringiendo a los valores esperados deseados de los operadores que acoplan pares de partículas a momento angular  $J_p$  e isoespín  $T_p$ <sup>2</sup>. Esto es[75, 76],

$$\left[ \hat{P}^\dagger \right]_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p} = \sum_{\alpha} \left[ \hat{P}_{\alpha}^\dagger \right]_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\alpha} \sqrt{2j_{\alpha} + 1} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}^{\dagger} \right]_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p} \quad (3.20)$$

donde  $\alpha$  el conjunto de números cuánticos asociados a la órbita  $(n_{\alpha}, l_{\alpha}, j_{\alpha}, s_{\alpha}, t_{\alpha})$  y los operadores de creación de pares acoplados a  $J_p, T_p$  vienen dados por la expresión:

$$\left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} \right]_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p} = \frac{\sqrt{1 - \delta_{\alpha\beta} (-1)^{J_p + T_p}}}{1 + \delta_{\alpha\beta}} \sum_{\substack{m_{j_a} m_{j_b} \\ m_{t_a} m_{t_b}}} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} \langle j_a m_{j_a} j_b m_{j_b} | J_p M_{J_p} \rangle \langle \frac{1}{2} m_{t_a} \frac{1}{2} m_{t_b} | T_p M_{T_p} \rangle \quad (3.21)$$

Así, definidos dichos operadores, las amplitudes asociadas a los distintos canales

---

<sup>2</sup>Para evitar cierta confusión con el espín e isoespín nuclear total, se añade el subíndice  $p$  para referirnos a los pares de nucleones.

de apareamiento, aquí denotados por  $\delta_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p}$ , vienen dadas por:

$$\delta_{01}^{01} = \frac{1}{2} \langle \phi | [\hat{P}]_{01}^{01} + [\hat{P}^\dagger]_{01}^{01} | \phi \rangle \quad (3.22a)$$

$$\delta_{0-1}^{01} = \frac{1}{2} \langle \phi | [\hat{P}]_{0-1}^{01} + [\hat{P}^\dagger]_{0-1}^{01} | \phi \rangle \quad (3.22b)$$

$$\delta_{00}^{01} = \frac{1}{2} \langle \phi | [\hat{P}]_{00}^{01} + [\hat{P}^\dagger]_{00}^{01} | \phi \rangle \quad (3.22c)$$

$$\delta_{00}^{10} = \frac{1}{2} \langle \phi | [\hat{P}]_{00}^{10} + [\hat{P}^\dagger]_{00}^{10} | \phi \rangle \quad (3.22d)$$

$$\delta_{\pm 10}^{10} = \frac{1}{2} \langle \phi | [\hat{P}]_{\pm 10}^{10} + [\hat{P}^\dagger]_{\pm 10}^{10} | \phi \rangle \quad (3.22e)$$

Por último, también es posible fijar ligaduras en los valores medios del operador momento angular. Si bien se restringen las coordenadas cartesianas  $x, y, z$  las dos primeras se reescriben en términos de los operadores escalera del siguiente modo:

$$\hat{J}_x = \frac{1}{2} (\hat{J}_+ + \hat{J}_-) \quad (3.23a)$$

$$\hat{J}_y = \frac{i}{2} (\hat{J}_- - \hat{J}_+) \quad (3.23b)$$

manteniendo la tercera componente  $\hat{J}_z$  con la definición habitual. Así, una de las aplicaciones inmediatas consiste en explorar distintas frecuencias de rotación variando la ligadura en el operador  $\hat{J}_x$ , de tal modo que

$$\omega = \langle \phi | \hat{J}_x | \phi \rangle \quad (3.24)$$

método que se conoce como *cranking*[77, 78] y que permite aumentar el espacio variacional rompiendo la simetría del reverso temporal.

La forma en la que se consigue que las funciones de onda HFB satisfagan dichos valores medios es modificando el funcional a minimizar. En efecto, el hamiltoniano de la forma (3.1) ahora incluirá un conjunto de términos asociados a las ligaduras impuestas. Así, teniendo en cuenta las ligaduras en  $N, Z$  y otros posibles operadores  $\hat{O}_i$  tendremos

$$\hat{H} \longrightarrow \hat{H}' = \hat{H} - \lambda_Z \hat{Z} - \lambda_N \hat{N} - \sum_i \lambda_i \hat{O}_i \quad (3.25)$$

donde los factores  $\lambda$  son los diferentes multiplicadores de Lagrange asociados a las ligaduras.

Este método, además, tiene una doble finalidad. Por un lado, nos permitirá explorar las superficies de energía en las diferentes direcciones dadas por las ligaduras impuestas. Por otro, la función de onda PGCM –(3.71)– será combinación lineal de dichos estados (una vez proyectados a buenos números cuánticos) lo que permite la inclusión de más correlaciones dadas por las fluctuaciones en los distintos operadores.

### 3.2.3. Ecuaciones variacionales HFB y PNVAP

Una vez definida la función de onda HFB, ahora será necesario que minimice el funcional correspondiente, ya sea el hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear habitual o aquel que incluye las respectivas ligaduras. En el caso sin ligaduras, será

$$E[|\phi\rangle] = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (3.26)$$

Dicho de otro modo, partiendo del principio variacional, se buscará el conjunto de operadores  $(\hat{\beta}^\dagger, \hat{\beta})$  y, por tanto, las matrices  $(U, V)$  óptimas que presenten la menor energía asociada a dicho hamiltoniano, esto es,

$$\delta \left( \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right) = 0 \quad (3.27)$$

Debido a la condición de unitariedad de la matriz  $W$ , las matrices  $(U, V)$  no son parámetros variacionales independientes, con lo que para minimizar la energía de HFB conviene parametrizar el espacio variacional de otra manera. El teorema de Thouless[79] permite dicha parametrización del espacio de funciones de onda prueba de tipo HFB, expresando cualquier vacío de cuasipartículas en términos de otro, siempre y cuando estos no sean ortogonales:

$$|\phi'\rangle = \langle\phi|\phi'\rangle \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{k < k'} \mathbb{Z}_{kk'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger\right) |\phi\rangle \quad (3.28)$$

donde  $\mathbb{Z}$  es la matriz antisimétrica de Thouless, dada por[16]

$$\mathbb{Z} = (VU^{-1})^* \quad (3.29)$$

por lo que la ecuación (3.27) se reescribiría tal que

$$\left(\frac{\partial E(\mathbb{Z})}{\partial \mathbb{Z}}\right)_{\mathbb{Z}=0} \delta \mathbb{Z} = 0 \quad (3.30)$$

Así, la derivación explícita de la energía respecto de los parámetros variacionales

$$\frac{\partial}{\partial \mathbb{Z}_{ll'}} \left( \frac{\langle\phi| \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{kk'} \mathbb{Z}_{kk'}^* \beta_k \beta_{k'}\right) \hat{H} \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{kk'} \mathbb{Z}_{kk'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger\right) |\phi\rangle}{\langle\phi| \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{kk'} \mathbb{Z}_{kk'}^* \beta_k \beta_{k'}\right) \exp\left(\frac{1}{2} \sum_{kk'} \mathbb{Z}_{kk'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger\right) |\phi\rangle} \right) \quad (3.31)$$

al utilizar la expresión del hamiltoniano nuclear en la base de cuasipartículas[16], se puede demostrar que nos conduce a la expresión siguiente:

$$H_{kk'}^{20} = \frac{\langle\phi|\hat{\beta}_{k'}\hat{\beta}_k\hat{H}|\phi\rangle}{\langle\phi|\phi\rangle} = 0 \quad (3.32)$$

que indica que el gradiente de la energía es nulo en la solución del problema variacional con funciones de onda de tipo HFB. Por último, en el caso de tener ligaduras en los distintos operadores, la expresión anterior quedaría

$$H^{20} - \lambda_Z Z^{20} - \lambda_N N^{20} - \lambda_i \sum_i O_i^{20} = 0 \quad (3.33)$$

donde se darán las expresiones correspondientes a los términos 20 de los distintos operadores junto con la expresión de la energía HFB en el siguiente apartado.

### Energía HFB

Con todo lo anterior, queda definido el criterio que deben satisfacer las funciones de onda prueba HFB para que minimicen la energía. Ahora, por tanto, definimos la energía de HFB así como algunas de las cantidades necesarias para su obtención. Teniendo en cuenta que la energía será el valor medio del hamiltoniano,

$$E^{HFB} = \frac{\langle \phi | \hat{H} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (3.34)$$

entonces,

$$E^{HFB} = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \frac{\langle \phi | \hat{c}_{l_1}^\dagger \hat{c}_{l_2} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} + \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \phi | \hat{c}_{l_1}^\dagger \hat{c}_{l_2}^\dagger \hat{c}_{l_4} \hat{c}_{l_3} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \quad (3.35)$$

y, dado que la función de onda prueba es vacío de los operadores de cuasipartículas, se puede llegar –gracias al teorema de Wick– a las siguientes contracciones

$$\rho_{ij} = \langle \phi | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i | \phi \rangle = (V^* V^T)_{ij} \quad (3.36)$$

$$\kappa_{ij} = \langle \phi | \hat{c}_j \hat{c}_i | \phi \rangle = (V^* U^T)_{ij} \quad (3.37)$$

que se conocen como matriz de densidad y tensor de apareamiento respectivamente. Así, utilizando las contracciones anteriores, la energía obtenida con la función de onda prueba vendría dada por

$$E^{HFB} = \text{Tr} \left[ t\rho + \frac{1}{2} (\Gamma\rho - \Delta\kappa^*) \right] \quad (3.38)$$

donde

$$\Gamma_{l_1 l_3} = \sum_{l_2 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_4 l_2} \quad (3.39)$$

$$\Delta_{l_1 l_2} = \frac{1}{2} \sum_{l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \kappa_{l_3 l_4} \quad (3.40)$$

son los campos de Hartree-Fock y apareamiento respectivamente. Así, en la última expresión se definen las energías de HF y de apareamiento como

$$E_{\text{HF}} = \frac{1}{2} \text{Tr} (\Gamma \rho) \quad (3.41)$$

$$E_{\text{pair}} = -\frac{1}{2} \text{Tr} (\Delta \kappa^*) \quad (3.42)$$

donde la última cantidad representa la cantidad de correlaciones de apareamiento que presenta la función de onda HFB. De este modo, según los índices de los campos involucrados, tenemos

$$E_{\text{pair}}^{pp(nn)} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left( \Delta_{a_{p(n)} b_{p(n)}} \kappa_{a_{p(n)} b_{p(n)}}^* \right) \quad (3.43)$$

$$E_{\text{pair}}^{pn} = -\frac{1}{2} \text{Tr} \left( \Delta_{a_p b_n} \kappa_{a_p b_n}^* + \Delta_{a_n b_p} \kappa_{a_n b_p}^* \right) \quad (3.44)$$

donde las correlaciones  $pn$  surgirán solamente en el caso de que la transformación HFB permita la mezcla de estados de protones y neutrones.

La energía total HFB será la mínima cuando el gradiente, dado por la expresión (3.32), sea nulo. Si se emplea nuevamente el teorema de Wick para las contracciones correspondientes, se puede llegar a [16]

$$H^{20} = (U^\dagger h V^*) - (V^\dagger h^T U^*) + (U^\dagger \Delta U^*) - (V^\dagger \Delta^* V^*) \quad (3.45)$$

siendo  $h = t + \Gamma$ . El resultado anterior, además, se puede generalizar para cualquier operador, que en el caso de ser a un solo cuerpo, la expresión del término  $O^{20}$  vendrá dada por

$$O^{20} = (U^\dagger O V^*) - (V^\dagger O^T U^*) \quad (3.46)$$

donde  $O_{ab} = \langle a | \hat{O} | b \rangle$ . Estas expresiones serán de crucial importancia para determinar la dirección de la minimización en el método del gradiente, expuesto en el apartado posterior.

## Energía PNVAP

Si bien el formalismo anterior permite obtener estados de cuasipartículas que satisficieran la condición de mínima energía, estos, dada la transformación HFB, no satisfacen la simetría del número de partículas. Así, una segunda forma de generar estados intrínsecos es proyectar a buen número de partículas previamente a la variación, método conocido como PNVAP (*Particle Number Variation After Projection*)<sup>3</sup>. Dado que los estados HFB no son autoestados de los operadores de número de partículas, ahora, en el proceso de minimización se trabajará con funciones de onda proyectadas a  $N, Z$ , esto es,

$$|\phi\rangle \rightarrow \hat{P}^N \hat{P}^Z |\phi\rangle = |\phi^{NZ}\rangle \quad (3.47)$$

donde los proyectores son de la forma

$$\hat{P}^N = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi_N(\hat{N}-N)} d\varphi_N \quad (3.48a)$$

$$\hat{P}^Z = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi_Z(\hat{Z}-Z)} d\varphi_Z \quad (3.48b)$$

que, habitualmente, se discretizan en el ángulo *gauge* para poder resolver la integral numéricamente. A este procedimiento se le conoce como discretización de Fomenko[83] y permite la siguiente reformulación

$$\hat{P}_L^N = \frac{1}{L} \sum_{l=1}^L e^{i\varphi_l(\hat{N}-N)} \quad (3.49)$$

y de igual modo para el número de protones, siendo  $\varphi_l = \frac{\pi l}{L}$ . Las particularidades de los métodos de restauración de simetrías se tratarán con mayor extensión en el apartado siguiente.

Así, la variación tomará las funciones de onda proyectadas como espacio varia-

---

<sup>3</sup>Aunque esta técnica no se limita solo a la proyección a buen número de partículas. En la literatura pueden encontrarse otras proyecciones, como a buen momento angular (AMVAP)[80] o incluyendo también isospín[81] y número másico[82]. Sin embargo, cualquiera de los dos casos anteriores requiere de un coste computacional mayor y está más allá del enfoque de este trabajo.



cional, esto es,  $|\phi^{NZ}\rangle$  en cada paso del gradiente. En este caso, la expresión de la energía proyectada viene dada por

$$E^{NZ} = \frac{\langle \phi | \hat{H} \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle} \quad (3.50)$$

donde se ha tenido en cuenta que  $[\hat{H}, \hat{P}] = 0$  y que  $\hat{P}^2 = \hat{P}$ . Entonces, teniendo en cuenta la definición de los proyectores en su forma cuantizada, ahora el cálculo de la energía vendrá dado por

$$E^{NZ} = \sum_{l_N, l_Z} \frac{\langle \phi | e^{i\varphi_{l_N}(\hat{N}-N)} e^{i\varphi_{l_Z}(\hat{Z}-Z)} | \phi \rangle}{\sum_{l_N, l_Z} \langle \phi | e^{i\varphi_{l_N}(\hat{N}-N)} e^{i\varphi_{l_Z}(\hat{Z}-Z)} | \phi \rangle} \frac{\langle \phi | \hat{H} e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \phi \rangle}{\langle \phi | e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \phi \rangle} \quad (3.51)$$

que habitualmente se separan los términos del solape del hamiltoniano (cociente derecho) y el solape de la norma (cociente izquierdo). En ambas cantidades, por tanto, es necesario hallar el solape entre dos vacíos de cuasipartículas diferentes, esto es,  $|\phi\rangle$  y  $|\tilde{\phi}\rangle = e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} |\phi\rangle$ .

Dado que en la sección posterior se muestra la obtención del solape de la norma incluyendo las proyecciones a momento angular y paridad, indicaremos aquí el método para hallar el solape del hamiltoniano.

El primer lugar, aplicando de nuevo el teorema de Thouless, podemos hallar la relación entre los dos vacíos de cuasipartículas. Esto es,

$$|\tilde{\phi}\rangle = \langle \phi | \tilde{\phi} \rangle \exp \left( \frac{1}{2} \sum_{k < k'} A_{kk'} \beta_k^\dagger \beta_{k'}^\dagger \right) |\phi\rangle \quad (3.52)$$

donde la relación entre las matrices  $(U, V)$  y la matriz de Thouless  $A$  se pueden obtener gracias a las propiedades de simetría de los operadores de creación y aniquilación de partículas. En efecto, si  $\hat{N}_\tau$  denota el operador número de protones o neutrones,

entonces

$$e^{-i\varphi\hat{N}_\tau}\hat{c}_k^\dagger e^{i\varphi\hat{N}_\tau} = e^{i\varphi}\hat{c}_k^\dagger \quad (3.53a)$$

$$e^{-i\varphi\hat{N}_\tau}\hat{c}_k e^{i\varphi\hat{N}_\tau} = e^{-i\varphi}\hat{c}_k \quad (3.53b)$$

para el caso en el que el índice  $k$  esté asociado al estado con el mismo isoespín que el operador  $\hat{N}_\tau$ . Así, las matrices  $(U, V)$  en función de  $\vec{\varphi} = (\varphi_{l_N}, \varphi_{l_Z})$  se puede demostrar que toman la siguiente forma:

$$U(\vec{\varphi}) = U^\dagger \mathbb{R} U + V \mathbb{R}^* V \quad (3.54a)$$

$$V(\vec{\varphi}) = V^T \mathbb{R} U + U^T \mathbb{R}^* V \quad (3.54b)$$

siendo

$$\mathbb{R} = \begin{pmatrix} e^{i\varphi_{l_Z}} \mathbb{I} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi_{l_N}} \mathbb{I} \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

esto es, separando la parte de protones y neutrones. Por tanto, la matriz de Thouless de la transformación (3.52) es

$$A(\vec{\varphi}) = (V(\vec{\varphi})U^{-1}(\vec{\varphi}))^* \quad (3.56)$$

Con esto, la aplicación del teorema de Wick generalizado[84] nos conduce a las nuevas definiciones de la matriz densidad y el tensor de apareamiento, en términos de las nuevas matrices de transformación HFB[40]:

$$\rho_{ij}(\vec{\varphi}) = \frac{\langle \phi | \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_i | \tilde{\phi} \rangle}{\langle \phi | \tilde{\phi} \rangle} = (\bar{V}(\vec{\varphi})V^T)_{ij} \quad (3.57a)$$

$$\kappa_{ij}^{10}(\vec{\varphi}) = \frac{\langle \phi | \hat{c}_j \hat{c}_i | \tilde{\phi} \rangle}{\langle \phi | \tilde{\phi} \rangle} = (\bar{V}(\vec{\varphi})U^T)_{ij} \quad (3.57b)$$

$$\kappa_{ij}^{01}(\vec{\varphi}) = \frac{\langle \phi | \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j^\dagger | \tilde{\phi} \rangle}{\langle \phi | \tilde{\phi} \rangle} = -(\bar{U}(\vec{\varphi})V^T)_{ij} \quad (3.57c)$$

donde

$$\bar{U}(\vec{\varphi}) = U^* + VA(\vec{\varphi}) \quad (3.58a)$$

$$\bar{V}(\vec{\varphi}) = V^* + UA(\vec{\varphi}) \quad (3.58b)$$

Así, para el solape del hamiltoniano, de modo similar al caso HFB, tendríamos la siguiente expresión

$$\langle \phi | \hat{H} e^{i\varphi_{lN} \hat{N}} e^{i\varphi_{lZ} \hat{Z}} | \phi \rangle = \text{Tr} \left[ t\rho(\vec{\varphi}) + \frac{1}{2} (\Gamma(\vec{\varphi})\rho(\vec{\varphi}) - \Delta^{10}(\vec{\varphi})\kappa^{01}(\vec{\varphi})) \right] \quad (3.59)$$

donde se han tenido en cuenta que los campos de HF y apareamiento ahora toman una forma ligeramente diferente:

$$\Gamma_{l_1 l_3}(\vec{\varphi}) = \sum_{l_2 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \rho_{l_4 l_2}(\vec{\varphi}) \quad (3.60)$$

$$\Delta_{l_1 l_2}^{10}(\vec{\varphi}) = \frac{1}{2} \sum_{l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \kappa_{l_3 l_4}^{10}(\vec{\varphi}) \quad (3.61)$$

$$\Delta_{l_1 l_2}^{01}(\vec{\varphi}) = \frac{1}{2} \sum_{l_3 l_4} \bar{v}_{l_3 l_4 l_1 l_2} \kappa_{l_3 l_4}^{01}(\vec{\varphi}) \quad (3.62)$$

Siguiendo la estructura del caso HFB, para obtener el estado que minimiza la energía proyectada a buen número de partículas, se deberá cumplir la condición dada por la expresión (3.63), esto es,

$$\delta E^{NZ} = \delta \left( \frac{\langle \phi | \hat{H} \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle} \right) = 0 \quad (3.63)$$

o bien, de modo más general, se tendrá en cuenta el funcional que incluye las distintas ligaduras, esto es

$$\delta \left( \frac{\langle \phi | \hat{H} P^Z P^N | \phi \rangle}{\langle \phi | P^Z P^N | \phi \rangle} - \sum_i \lambda_i \langle \phi | \hat{O}_i | \phi \rangle \right) = 0 \quad (3.64)$$

donde se pone de manifiesto que las ligaduras se imponen sobre las funciones de onda sin proyectar a buen número de partículas. Teniendo en cuenta que la variación de la energía proyectada,  $E^P$ , es de la forma[85]

$$\delta E^P = \frac{1}{2} \sum_{kk'} \frac{\partial E^P}{\partial A_{kk'}^*} \delta A_{kk'}^* + \frac{\partial E^P}{\partial A_{kk'}} \delta A_{kk'} \quad (3.65)$$

se puede demostrar que conduce a la siguiente dirección de minimización

$$\mathcal{H}^{20} = \frac{\langle \phi | \beta_{k'} \beta_k (\hat{H} - E^{NZ}) \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle} \quad (3.66)$$

que, teniendo en cuenta la dependencia en los ángulos de protones y neutrones, debido a la proyección y utilizando el teorema de Wick generalizado, el solape anterior tomaría la forma[40]

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{20}(\vec{\varphi}) = & A(\vec{\varphi}) \left[ \text{Tr} \left( t\rho(\vec{\varphi}) + \frac{1}{2} (\Gamma(\vec{\varphi})\rho(\vec{\varphi}) - \Delta^{10}(\vec{\varphi})\kappa^{01}(\vec{\varphi})) \right) - E^{NZ} \right] + \\ & (\bar{U}(\vec{\varphi})[t + \Gamma(\vec{\varphi})]\bar{V}(\vec{\varphi})) - (\bar{V}^T(\vec{\varphi})[t + \Gamma(\vec{\varphi})]\bar{U}(\vec{\varphi})) + (\bar{U}^T(\vec{\varphi})\Delta^{10}(\vec{\varphi})\bar{U}(\vec{\varphi})) \\ & - (\bar{V}^T(\vec{\varphi})\Delta^{01}(\vec{\varphi})\bar{V}(\vec{\varphi})) \end{aligned} \quad (3.67)$$

### 3.2.4. El método del gradiente

Teniendo en cuenta el resultado anterior, la obtención de la función de onda óptima puede ser calculada mediante cualquier procedimiento de minimización. Si bien el más habitual, y el que se encuentra implementado en el código TAURUS, es el método del gradiente[86], en la literatura pueden encontrarse otros más sofisticados, entre los más conocidos se encuentra el método del gradiente conjugado[87].

El método iterativo que se emplea en este trabajo es el siguiente:

1. El cálculo comienza con una función de onda prueba  $|\phi_0\rangle$  –también conocida como semilla– caracterizada por los coeficientes de matrices de transformación HFB ( $U_0, V_0$ ), los cuales preservan unitariedad y pueden satisfacer cualquiera de las simetrías mencionadas anteriormente.

2. Se calcula el gradiente de la energía y se escoge la dirección en la que se hace la minimización, esto es,

$$\mathbb{Z}^0 = -\eta H^{20}(|\phi\rangle) \quad (3.68)$$

siendo  $\eta$  el paso del gradiente, Cuanto menor sea este valor, menor será la variación de la función de onda respecto de la anterior. Dicho paso puede fijarse a un valor constante durante todo el proceso, o ir variando con precondicionadores [86] o mediante descensos tipo bola pesada (*heavy-ball*)[88]. En el caso de restringir el cálculo con ciertas ligaduras se cambiará el término  $H^{20}$  por la expresión (3.33). Del mismo modo, cuando se considere el espacio de funciones de onda proyectadas, se utilizará  $\mathcal{H}^{20}$ .<sup>4</sup>

3. Se propone una nueva función dada por el teorema de Thouless,  $|\phi_1\rangle$ , tal que

$$|\phi_1\rangle = \langle\phi_0|\phi_1\rangle \exp\left(\sum_{k<k'} \mathbb{Z}_{kk'}^0 \beta_k^\dagger(|\phi_0\rangle) \beta_{k'}^\dagger(|\phi_0\rangle)\right) |\phi_0\rangle \quad (3.69)$$

4. Con la función de onda anterior, se obtiene la nueva dirección de minimización y se comprueba que

$$H^{20}(|\phi_1\rangle) H^{20*}(|\phi_1\rangle) \leq \delta \quad (3.70)$$

siendo  $\delta$  un valor cercano a cero. En caso contrario, se vuelve al paso 2 con la nueva dirección de minimización. Al igual que en el paso 2, el cálculo con ligaduras deberá tener en cuenta en conjunto de términos 20 de los respectivos operadores.

### 3.3. Proyección de estados intrínsecos a buenos números cuánticos

Una vez hallado el estado, o conjunto de estados en los que se exploran determinados grados de libertad internos, el segundo paso para la construcción de la función de onda nuclear PGCM es restaurar el conjunto de simetrías rotas.

<sup>4</sup>Por simplicidad, en el resto de pasos del método del gradiente se considera la cantidad  $H^{20}$ .

Como ya se ha mencionado, los estados obtenidos en el apartado anterior, en general, no son autoestados de los operadores de simetría que el hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear exacto debe satisfacer. Por tanto, si queremos tener una mejor descripción del estado fundamental y del conjunto de estados excitados, deberemos restaurar las simetrías que se hayan roto en las funciones de onda intrínseca halladas con HFB o PNVAP. Dicha restauración se realiza mediante técnicas de proyección a buenos números cuánticos.

Aunque la proyección, como se ha mencionado anteriormente, puede realizarse antes o después de la variación, este apartado se centra en el cálculo PAV, esto es, después de la variación. Donde la función de función de onda proyectada será:

$$|\Phi^{JMKNZ\pi}\rangle = \hat{P}_{MK}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z \hat{P}^\pi |\phi\rangle \quad (3.71)$$

donde se han incluido los proyectores asociados a las simetrías que se pueden restaurar en TAURUS, esto es, número de partículas ( $\hat{P}^{N,Z}$ ), momento angular ( $P_{MK}^J$ ) y paridad ( $\hat{P}^\pi$ ).

### 3.3.1. Proyección simultánea a buen número de partículas, momento angular y paridad

La transformación de Bogoliubov y las correlaciones de apareamiento propias de los estados obtenidos en el primer paso del PGCM hacen que las funciones de onda no sean autoestados de los operadores  $\hat{N}$ ,  $\hat{Z}$ . Así, emplearemos los operadores (3.48) sobre el estado intrínseco HFB o PNVAP. Además, es habitual trabajar con estados que ya no presentan la simetría esférica, o incluso explorar capas que presentan estados del oscilador con distinta paridad, por lo que también será necesario restaurar estas dos últimas simetrías.

Así, para hallar el valor esperado de cualquier operador,  $\hat{O}$  –ya sea hamiltoniano, números de ocupación, momento angular, etc.– entre dos estados proyectados a  $N$ ,  $Z$  y  $J$ , bastará con calcular

$$\langle O^{NZ;JMK'K} \rangle = \frac{\langle \phi | \hat{P}^{N\dagger} \hat{P}^{Z\dagger} \hat{P}_{MK'}^{J\dagger} \hat{P}^{\pi\dagger} \hat{O} \hat{P}^\pi \hat{P}_{MK}^J \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}^{N\dagger} \hat{P}^{Z\dagger} \hat{P}_{MK'}^{J\dagger} \hat{P}^{\pi\dagger} \hat{P}^\pi \hat{P}_{MK}^J \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle} \quad (3.72)$$

donde, para simplificar, podemos utilizar algunas propiedades de los operadores que aparecen en la expresión anterior. Así, en primer lugar, para los proyectores a buen número de partículas tenemos que se cumple que

$$(\hat{P}^{N_\tau})^\dagger = \hat{P}^{N_\tau} \quad (3.73a)$$

$$(\hat{P}^{N_\tau})^2 = \hat{P}^{N_\tau} \quad (3.73b)$$

$$[\hat{P}^Z, \hat{P}^N] = 0 \quad (3.73c)$$

$$\hat{P}^{JM} \longrightarrow \hat{P}_{MK}^J = \frac{2J+1}{16\pi^2} \int \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) d\Omega \quad (3.74)$$

Por otro lado, el proyector a buen momento angular viene dado por

$$\hat{P}_{MK}^J = \frac{2J+1}{16\pi^2} \int_{\Omega} \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) d\Omega \quad (3.75)$$

siendo  $\mathcal{D}$  la matriz D de Wigner, cuyos elementos vienen dados por los elementos de matriz del operador de rotaciones en la base esférica,

$$\mathcal{D}_{MK}^J(\Omega) = \langle JM | \hat{R}(\Omega) | JK \rangle = e^{-iM\alpha} d_{MK}^J(\beta) e^{iK\gamma} \quad (3.76)$$

donde  $d$  es la matriz reducida de Wigner, cuyos valores se pueden encontrar tabulados y  $\hat{R}(\Omega)$  es el operador de rotaciones SO(3) que satisface[89]

$$\hat{R}(\Omega) = e^{-i\alpha\hat{J}_z} e^{-i\beta\hat{J}_y} e^{-i\gamma\hat{J}_z} \quad (3.77)$$

$$\hat{R}(\Omega) |JM\rangle = \sum_{M'} \mathcal{D}_{M'M}^J(\Omega) |JM'\rangle \quad (3.78)$$

$$\hat{R}(\Omega) = \sum_{ij} R_{ij}(\Omega) c_i^\dagger c_j \quad (3.79)$$

donde  $M$  se refiere a la tercera componente de  $J$  sobre el eje OZ, en el sistema de referencia de laboratorio y  $K$  se refiere a la proyección sobre el eje de simetría en el sistema de referencia fijado en el cuerpo. Además, la integración en los tres ángulos de Euler viene dada por

$$\int_{\Omega} d\Omega = \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{\pi} d\beta \sin \beta \int_0^{4\pi} d\gamma \quad (3.80)$$

Así, el proyector anterior satisface también las siguientes propiedades:

$$(\hat{P}_{MK}^J)^\dagger = \hat{P}_{KM}^J \quad (3.81a)$$

$$\hat{P}_{M_1 K_1}^{J_1} \hat{P}_{M_2 K_2}^{J_2} = \delta_{J_1 J_2} \delta_{K_1 M_2} \hat{P}_{M_1 K_2}^{J_1} \quad (3.81b)$$

$$\left[ \hat{P}_{MK}^J, \hat{P}^{N\tau} \right] = 0 \quad (3.81c)$$

Por último, tenemos que considerar el proyector a paridad, dado por

$$\hat{P}^\pi = \frac{1}{2} \left( \mathbb{I} + \pi \hat{\Pi} \right) \quad (3.82)$$

que se define según su actuación sobre los estados de oscilador armónico de la base. Esto es, siendo un estado arbitrario  $\alpha$ , entonces,

$$\hat{\Pi} |\alpha\rangle = (-1)^{l_\alpha} |\alpha\rangle \quad (3.83)$$

siendo, además,  $\pi = +1$  para los estados de paridad positiva y  $\pi = -1$  para los de paridad negativa. Dicho proyector satisface

$$(\hat{P}^\pi)^\dagger = \hat{P}^\pi \quad (3.84a)$$

$$(\hat{P}^\pi)^2 = \hat{P}^\pi \quad (3.84b)$$

$$\left[ \hat{P}^\pi, \hat{P}^{N\tau} \right] = 0 \quad (3.84c)$$

$$\left[ \hat{P}^\pi, \hat{P}_{MK}^J \right] = 0 \quad (3.84d)$$

Así, con todo lo anterior, tras un poco de álgebra, la expresión (3.72) nos queda como

$$\langle O^{NZ;J} \rangle = \frac{\langle \phi | \hat{O} \hat{P}_{KK'}^J \hat{P}^\pi \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle}{\langle \phi | \hat{P}_{KK'}^J \hat{P}^\pi \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle} \quad (3.85)$$



### 3.3.2. Obtención del solape de la norma

De la expresión (3.85) vemos que surgen dos cantidades relevantes para la obtención de cualquier valor medio entre estados proyectados: el solape del hamiltoniano (numerador) y el solape de la norma (denominador).

Dado que el último de estos dos aparece en el cálculo de cualquier valor medio ( $\hat{J}^2$ ,  $\hat{N}$ ,  $\hat{Z}$ ,  $\hat{H}$ , etc.), se ve necesario desarrollar explícitamente cómo se obtiene tanto analítica como numéricamente. La estrategia a seguir es similar al caso PNVAP, esto es, hallar el solape entre dos estados tal que uno de ellos está rotado en un cierto ángulo *gauge* (de protones y neutrones), espacialmente (dado por los ángulo de Euler), y transformado bajo el operador de paridad.

Para mayor generalidad, consideraremos que ambos estados presentan ligaduras en ciertos operadores con diferentes valores medios, de tal modo que dependen de los grados de libertad denotados por  $q$  y  $q'$ . Así, abreviando la notación  $\Gamma \equiv J\pi NZ$ , definimos el solape de la norma entre estados proyectados como

$$\mathcal{N}^{\Gamma KK'}(q, q') = \langle \Phi^{\Gamma K}(q) | \Phi^{\Gamma K'}(q') \rangle = \langle \phi(q) | \hat{P}_{KK'}^J \hat{P}^\pi \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi(q') \rangle \quad (3.86)$$

donde se han utilizado las propiedades de simetría del proyector a momento angular. Así, teniendo en cuenta las definiciones correspondientes, el solape anterior quedaría:

$$\begin{aligned} \mathcal{N}^{\Gamma KK'}(q, q') &= \frac{2J+1}{32\pi^2} \frac{1}{L_Z L_N} \sum_{l_Z=1}^{L_Z} \sum_{l_N=1}^{L_N} e^{-i\varphi_{l_N} N} e^{-i\varphi_{l_Z} Z} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K} d\alpha \cdot \\ &\cdot \int_0^{4\pi} e^{i\gamma K'} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{KK'}^{J*}(\beta) \langle \phi(q) | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} (\mathbb{I} + \pi \hat{\Pi}) | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (3.87)$$

y, dado que estamos considerando también la proyección paridad, el solape que aparece en la expresión habrá que desarrollarlo como sigue

$$\begin{aligned} n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') &= \langle \phi(q) | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} (\mathbb{I} + \pi \hat{\Pi}) | \phi(q') \rangle = \\ &\langle \phi(q) | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} | \phi(q') \rangle + \pi \langle \phi(q) | \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} \hat{\Pi} | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (3.88)$$

por lo que tendremos que evaluar los dos solapes anteriores. Así, por simplicidad, nos centramos en el segundo de ellos (que incluye todos los términos posibles). Llamando matriz de rotaciones generalizada al contenido del segundo solape,

$$\hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) = \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_L N} e^{i\varphi_L Z} \hat{\Pi} \quad (3.89)$$

que no es más que la generalización del solape que nos encontrábamos en el caso PNVAP, incluyendo ahora el resto de operadores<sup>5</sup>. Dicho operador debe cumplir las mismas propiedades de anticonmutación fermiónicas, unitariedad y que no mezcle operadores de creación y destrucción[90]

$$\hat{\mathbb{R}}\{c_i^\dagger, c_j\}\hat{\mathbb{R}}^\dagger = \delta_{ij} \quad (3.90a)$$

$$\hat{\mathbb{R}}\hat{\mathbb{R}}^\dagger = \hat{\mathbb{R}}^\dagger\hat{\mathbb{R}} = \mathbb{I} \quad (3.90b)$$

$$\hat{\mathbb{R}} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \hat{\mathbb{R}}^\dagger = \begin{pmatrix} \mathbb{R}^\dagger & 0 \\ 0 & \mathbb{R}^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c \\ c^\dagger \end{pmatrix} \quad (3.90c)$$

Entonces, el solape a calcular será  $\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle$ . Si bien existen métodos tales como el de Onishi[91], en este trabajo se emplea el método del pfaffiano[92] el cual evita el problema de la ambigüedad del signo de solape. En particular, la implementación numérica del cálculo del solape sigue la forma desarrollada por B. Avez y M. Bender[93].

Denotando los estados final e inicial con los subíndices  $a$  y  $b$ , se puede definir la matriz  $\mathbb{M}$  en función de la matriz de Thouless –asociada a los estados final ( $|\phi_a(q)\rangle$ ) e inicial ( $|\tilde{\phi}_b(q')\rangle = \hat{\mathbb{R}}|\phi_b(q')\rangle$ )– transformada a la base canónica,  $A_{a/b} = \left(V_{a/b}U_{a/b}^{-1}\right)^*$ , y la matriz de la transformación unitaria asociada a las diferentes proyecciones,  $\mathbb{R}$ , según la expresión

$$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} A_b & -\mathbb{R}^{-1} \\ (\mathbb{R}^{-1})^T & -A_a^* \end{pmatrix} \quad (3.91)$$

donde los elementos de matriz de las diferentes proyecciones en la base esférica vienen

<sup>5</sup>En el caso PNVAP, solo se tendrían en cuenta los términos *gauge* de la proyección a número de partículas, dado que los operadores  $\hat{R}(\Omega)$  y  $\hat{\Pi}$  se sustituirían por  $\hat{\mathbb{I}}$ .

dados por

$$(\mathbb{R})_{ab} = e^{i\varphi_{1N} \delta_{m_{t_b} 1/2}} e^{i\varphi_{1Z} \delta_{m_{t_b} -1/2}} e^{im_{j_a} \alpha} d_{m_{j_a} m_{j_b}}^{j_a}(\beta) e^{i\gamma m_{j_b}} (-1)^{l_b} \quad (3.92)$$

entonces, el solape vendrá dado por la expresión siguiente[93] :

$$n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = (-1)^{n(n+1)/2} (-1)^{r_a(r_a+1)/2} (-1)^{\sum_k n+i_{k_a} + \sum_k i_{k_b}} \det(\mathbb{R}) \text{pf}(\mathbb{M}) \quad (3.93)$$

donde ya se tiene en cuenta la posible inclusión de estados totalmente ocupados (desocupados). En efecto, en dicho caso, será necesario eliminar las filas y columnas asociadas en la matriz  $\mathbb{M}$  y tener en cuenta el conjunto de fases anteriores. Así, en la expresión (3.93)  $n$  indica el número de estados en la base de partícula independiente,  $r_a$  el número de estados completamente ocupados e  $i_{k_a/b}$  indica el índice de dichos estados.

### 3.3.3. Obtención del solape del hamiltoniano

Similar al solape anterior, el término asociado al hamiltoniano, dado por

$$\mathcal{H}^{\Gamma K K'} = \langle \Phi^{\Gamma K}(q) | \hat{H} | \Phi^{\Gamma K'}(q') \rangle = \langle \phi(q) | \hat{H} \hat{P}_{KK'}^J \hat{P}^\pi \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi(q') \rangle \quad (3.94)$$

que, desarrollando en los operadores de las distintas proyecciones, queda de la forma

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\Gamma K K'} &= \frac{2J+1}{32\pi^2} \frac{1}{L_Z L_N} \sum_{l_Z=1}^{L_Z} \sum_{l_N=1}^{L_N} e^{i\varphi_{1N} N} e^{i\varphi_{1Z} Z} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K} d\alpha \cdot \\ &\cdot \int_0^{4\pi} e^{i\gamma K'} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{KK'}^{J*}(\beta) \langle \phi(q) | \hat{H} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_{1N} \hat{N}} e^{i\varphi_{1Z} \hat{Z}} (\mathbb{I} + \pi \hat{\Pi}) | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (3.95)$$

por lo que tendremos que evaluar el solape que aparece al final de la expresión anterior. Para ello, utilizaremos el teorema de Wick generalizado de nuevo. Dado el hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear, calcularemos por separado los términos de energía cinética e interacción a dos cuerpos.

En primer lugar, para el término de energía cinética tendremos

$$\sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \langle \phi(q) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2} \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) e^{i\varphi_{l_N} \hat{N}} e^{i\varphi_{l_Z} \hat{Z}} (\mathbb{I} + \pi \hat{\Pi}) | \phi(q') \rangle \quad (3.96)$$

por lo que si reescribimos de tal modo que podemos utilizar las contracciones habituales mediante el teorema de Wick, entonces

$$e_{kin}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \sum_{l_1 l_2} t_{l_1 l_2} \frac{\langle \phi(q) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2} \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle} \cdot \langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle \quad (3.97)$$

de donde vemos que estas expresiones serán válidas, si y solo si el solape entre los estados final e inicial es distinto de cero. Dado que ahora se necesitan evaluar un mayor número de contracciones, explicitamos la transformación que relaciona ambos vacíos,  $\hat{T}_{q \rightarrow q'}$  junto con el operador de rotaciones generalizado,

$$\hat{\mathbb{T}} | \phi(q) \rangle = \hat{\mathbb{R}} \hat{T}_{q \rightarrow q'} | \phi(q) \rangle = \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle = | \tilde{\phi}(q') \rangle \quad (3.98)$$

por tanto, se debe cumplir

$$\begin{pmatrix} \beta(q) \\ \beta^\dagger(q) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde{\beta}(q') \\ \tilde{\beta}^\dagger(q') \end{pmatrix} \quad (3.99)$$

De este modo, utilizando la transformación de Bogoliubov y la relación entre los vacíos dada por (3.98), la expresión (3.99) quedaría

$$\begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^\dagger(q) & V^\dagger(q) \\ V^T(q) & U^T(q) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbb{R} & 0 \\ 0 & \mathbb{R}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U(q') & V^*(q') \\ V(q') & U^*(q') \end{pmatrix} \quad (3.100)$$

Con todo esto, se puede llegar a que las contracciones de los operadores de cua-

sipartícula vienen dadas por [41, 94],

$$\frac{\langle \phi(q) | \beta_l(q) \beta_{l'}(q) \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle} = -(T_{12} T_{22}^{-1})_{ll'} \quad (3.101)$$

$$\frac{\langle \phi(q) | \tilde{\beta}_l^\dagger(q) \tilde{\beta}_{l'}^\dagger(q) \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \mathbb{R} | \phi(q') \rangle} = -(T_{22}^{-1} T_{21})_{ll'} \quad (3.102)$$

$$\frac{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}} \beta_l^\dagger(q) \beta_{l'}^\dagger(q) | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle} = -(T_{22}^{-1} T_{21})_{ll'} \quad (3.103)$$

$$\frac{\langle \phi(q) | \beta_l(q) \tilde{\beta}_{l'}^\dagger(q) \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \mathbb{R} | \phi(q') \rangle} = (T_{22}^T)_{ll'}^{-1} \quad (3.104)$$

que, junto con las relaciones entre los operadores de partículas y cuasipartícula

$$c_l = \sum_k \tilde{U}_{lk}(q') \tilde{\beta}_k(q') + \tilde{V}_{lk}^*(q') \tilde{\beta}_k^\dagger(q') \quad (3.105)$$

$$c_l^\dagger = \sum_k \tilde{U}_{lk}^*(q') \tilde{\beta}_k^\dagger(q') + \tilde{V}_{lk}(q') \tilde{\beta}_k(q') \quad (3.106)$$

las contracciones de los operadores de creación y destrucción serán

$$\rho_{ll'}^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \frac{\langle \phi(q) | c_l^\dagger c_{l'} \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle} = (\mathbb{R} V^*(q') T_{22}^{-1} V^T(q))_{ll'} \quad (3.107)$$

$$\kappa_{ll'}^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \frac{\langle \phi(q) | c_{l'} c_l \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle} = (\mathbb{R} V^*(q') T_{22}^{-1} U^T(q))_{ll'} \quad (3.108)$$

$$\kappa_{ll'}^{01}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \frac{\langle \phi(q) | c_l^\dagger c_{l'}^\dagger \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}} | \phi(q') \rangle} = (\mathbb{R} U^*(q') T_{22}^{-1} V^T(q))_{ll'} \quad (3.109)$$

Por tanto, la expresión del solape para la energía cinética proyectada vendrá dada por

$$e_{kin}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \text{Tr} [t \rho^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q')] n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \quad (3.110)$$

siendo  $n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q')$  el solape de la norma que aparece como multiplicando en la expresión (3.97) y cuya obtención numérica viene dada por (3.93).

Vayamos ahora con el término de interacción a dos cuerpos. Tenemos que calcular

el siguiente solape:

$$e_{int}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \frac{1}{4} \sum_{l_1 l_2 l_3 l_4} \bar{v}_{l_1 l_2 l_3 l_4} \frac{\langle \phi(q) | c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger c_{l_4} c_{l_3} \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle}{\langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle} \cdot \langle \phi(q) | \hat{\mathbb{R}}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi) | \phi(q') \rangle \quad (3.111)$$

por lo que utilizando las contracciones definidas anteriormente e introduciendo los campos de Hartree-Fock y de apareamiento dados por

$$\Gamma_{ll'}^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \sum_{mm'} \bar{v}_{lml'm'} \rho_{m'm}^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \quad (3.112)$$

$$\Delta_{ll'}^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \sum_{mm'} \bar{v}_{ll'mm'} \kappa_{mm'}^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \quad (3.113)$$

con un poco de álgebra se puede llegar a que

$$e_{int}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \frac{1}{2} \text{Tr} \left[ \Gamma^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \rho^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') - \Delta^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \kappa^{01}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \right] n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \quad (3.114)$$

De este modo, se ve fácilmente que si  $\mathbb{R}(0, 0, 0, 0)$  y  $q = q'$ , las expresiones coinciden con las soluciones HFB. Por último y para dar una expresión que englobe todo lo anterior, la energía proyectada a buen número de partículas, paridad y momento angular vendrá dada, por tanto, por

$$E^{\Gamma KK'}(q, q') = \frac{\mathcal{H}^{\Gamma KK'}(q, q')}{\mathcal{N}^{\Gamma KK'}(q, q')} \quad (3.115)$$

### 3.3.4. Aspectos numéricos de la proyección

Habitualmente, la obtención de energías proyectadas requiere un coste computacional alto, dadas las integrales en 5 dimensiones (dos ángulos *gauge* y tres ángulos de Euler) que aparecen en las expresiones de los apartados anteriores. Dichas integrales son resueltas numéricamente mediante dos formas: discretización de Fomenko para los ángulos *gauge* y  $\alpha, \gamma$  de la proyección a momento angular angular o mediante el método Gauss-Legendre[95] para el ángulo  $\beta$ . Así, es conveniente tener en cuenta

las posibles simetrías de las funciones de onda intrínsecas para reducir al máximo los intervalos de integración.

A modo de ejemplo, consideramos dos reducciones posibles en dos de los casos más habituales en cálculos de proyección. En primer lugar, se puede demostrar que el intervalo de integración en  $\gamma$  –que originalmente era  $[0, 4\pi]$ – se reduciría a  $[0, 2\pi]$ , lo que transformaría el proyector del siguiente modo[96]:

$$\hat{P}_{MK}^J = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^\pi d\beta \sin\beta \int_0^{2\pi} d\gamma \mathcal{D}_{MK}^{J*}(\alpha, \beta, \gamma) \hat{R}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (3.116)$$

y, dado que en ningún caso mezclaremos estados con distinto tipo de momento angular<sup>6</sup>, esta reducción estará presente en las expresiones que se muestren a partir de ahora y que involucren esta proyección. Así, dado que estamos reduciendo el intervalo a la mitad, será posible reducir también en la misma proporción (aproximadamente) los puntos de integración en  $\gamma$ .

Otra caso habitual, es la proyección de estados que preservan axialidad. Aquí, la única posibilidad para que el solape del hamiltoniano y de la norma no se anulen es que  $K = 0$ . Esto implica que la integral sobre los ángulos de Euler, se pueda modificar para evitar integrales que no son necesarias. En efecto, sea  $|\phi_1\rangle$  una función de ondas que preserva axialidad, entonces,

$$\langle \phi_1 | \hat{P}_{00}^J | \phi_1 \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int_0^\pi \sin\beta d_{00}^{J*}(\beta) \langle \phi_1 | \hat{R}(\Omega) | \phi_1 \rangle d\beta \quad (3.117)$$

Así, en el caso de trabajar con el solape de dos estados, de los cuales uno de ellos,  $|\phi_1\rangle$ , es axial y el otro,  $|\phi_2\rangle$ , triaxial, por analogía, el solape vendrá dado por

$$\langle \phi_2 | \hat{P}_{K0}^J | \phi_1 \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} e^{iK\alpha} d\alpha \int_0^\pi \sin\beta d_{K0}^{J*}(\beta) \langle \phi_2 | \hat{R}(\Omega) | \phi_1 \rangle d\beta \quad (3.118)$$

o bien que ahora el estado axial sea el bra, por lo que

$$\langle \phi_1 | \hat{P}_{0K'}^J | \phi_2 \rangle = \frac{2J+1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} e^{iK'\gamma} d\gamma \int_0^\pi \sin\beta d_{0K'}^{J*}(\beta) \langle \phi_2 | \hat{R}(\Omega) | \phi_1 \rangle d\beta \quad (3.119)$$

---

<sup>6</sup>A veces denotados como autoestados de la signatura al cuadrado, esto es,  $\hat{\Pi}_J = (\hat{R}_i^2)$ , siendo  $i = x, y, z$ .

Este tipo de reducciones pueden darse también en los ángulos gauge de protones y neutrones[71] –siempre y cuando la función de onda intrínseca sea de HF en alguno de los canales de isoespín– por lo que el cálculo puede reducirse notablemente en comparación con la integración completa.

Otro punto fundamental para la evaluación de este coste es el número de puntos de integración. En efecto, dado que la integración es numérica, es necesario fijar un determinado número de puntos que abarquen de la forma más eficiente el conjunto de intervalos asociados a las distintas variables. Así, un elevado número de puntos, producirá –en general y si no hay problemas con la aplicación del teorema de Wick– buenos resultados con gran exactitud numérica, pero requerirá demasiado tiempo de cálculo.

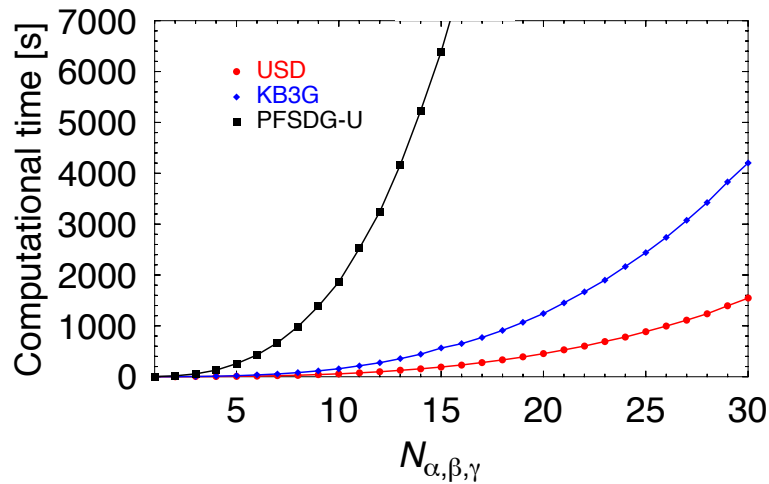


Figura 3.1: Tiempo de cálculo para distinto número de puntos de integración en los ángulos de Euler para un estado triaxial con  $Z = 4$ ,  $N = 8$  en el espacio de valencia asociado a las interacciones USD, KB3G y PFSDG. Para el cálculo se ha utilizado un Intel Xeon E5-2650L v3 @ 1.80 GHz. El tiempo de cálculo dependerá de las especificaciones técnicas del procesador que se use.

Así, un modo eficiente de proceder, es buscar un valor mínimo para la discretización y que, sin embargo, preserve la buena convergencia de los resultados. Como criterio de convergencia, por tanto, se suele observar el valor medio de algunos operadores –habitualmente  $\langle \hat{J}^2 \rangle$  o el número de partículas– para discernir si se necesitan más o menos puntos de integración.



Esto último adquiere relevancia cuando se quiere realizar el cálculo PGCM completo, esto es, generar una malla de  $N_{GCM}$  funciones de ondas que explore distintos grados de libertad y, por tanto, se requiere de  $N_{GCM}^2$  cálculos de solapes proyectados. En la Fig. 3.1 se muestra, a modo de ejemplo, cómo varía el coste computacional en función de los puntos integración y el espacio de valencia escogidos para el caso de un estado triaxial con 4 protones y 8 neutrones, donde se ha tomado el mismo valor para los tres valores  $N_\alpha$ ,  $N_\beta$  y  $N_\gamma$  y 9 puntos de Fomenko para protones y neutrones. Se puede ver que a medida que la interacción incluye un mayor número de capas, el tiempo requerido para la proyección es mayor. Por ejemplo, para 20 puntos de integración en los tres ángulos de Euler, el cálculo con la interacción USD requiere 453 s (7.5 min), mientras que para la KB3G se necesitan 1242 s (20.7 min). Aún así, el tiempo de cálculo dependerá de las especificaciones técnicas del procesador en el que se ejecute el código.

En el cuadro 3.1 se muestran algunos valores medios entre un estado intrínseco proyectado que satisface distintos  $JMK$ . Así, se puede observar que bastaría con 18 puntos de integración para poder afirmar que el estado proyectado ya es autoestado del operador  $J^2$ .

$N_{\alpha,\beta,\gamma}$	$\langle 000 J^2 000\rangle$	$\langle 200 J^2 200\rangle$	$\langle 20 \pm 2 J^2 20 \pm 2\rangle$	$\langle 400 J^2 400\rangle$
5	0.04093	5.74227	6.55563	15.63803
10	0.00000	6.12510	6.21895	20.00096
14	0.00000	6.00000	6.00009	20.00000
18	0.00000	6.00000	6.00000	20.00000
22	0.00000	6.00000	6.00000	20.00000

Cuadro 3.1: Algunos valores medios de  $J^2$  tras el cálculo PNAMP en función de los puntos de integración para un estado triaxial de  $^{26}\text{Ne}$ .

En este trabajo se tendrá en cuenta un número de puntos de integración suficiente para garantizar que los valores esperados proyectados de los operadores más habituales, tales como número de partículas y momento angular, difieran de los valores nominales en menos de  $10^{-5}$ .

## 3.4. Ansatz GCM

### 3.4.1. Conceptos fundamentales

Una vez obtenidos nuestros estados intrínsecos con las simetrías restauradas, aún nos podemos acercar más a la solución exacta considerando la combinación lineal de varios estados que presentan distintos valores para unos ciertos parámetros colectivos. Así, los parámetros –conocidos como coordenadas generadoras– más habituales y que también se emplean en este trabajo son deformaciones,  $\beta_2, \gamma$  y amplitudes de apareamiento,  $\delta$ , cuyas definiciones se han expuesto en apartados anteriores. Si llamamos al conjunto de coordenadas  $\vec{q} = (\beta_2, \gamma, \delta_{nm}, \dots)$ , entonces, la función de ondas GCM se relaciona con los estados intrínsecos según la expresión (3.2), esto es,

$$|\Psi_\sigma^{JMNZ\pi}\rangle = \sum_{qK} f_{\sigma;qK}^{JMNZ\pi} \hat{P}_{MK}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z \hat{P}^\pi |\phi(q)\rangle \quad (3.120)$$

Como ya se ha mencionado, el último de los pasos del formalismo PGCM consiste en obtener los pesos de cada estado intrínseco, esto es,  $f_{\sigma;qK}^{JMNZ\pi}$  mediante la resolución de la ecuación de Hill-Wheeler-Griffin discretizada (3.3) que depende explícitamente de la matriz de solapes de la norma y del hamiltoniano. Así, es fácil ver que la ecuación HWG consiste en un problema de autovalores y autovectores. Sin embargo, los estados no son ortogonales y puede que no sean linealmente independientes, por lo que es necesario –en primer lugar– construirnos una base ortogonal. Aunque esto se puede lograr mediante el procedimiento de Gram-Schmidt, lo habitual es diagonalizar primero los solapes de la norma para construir una nueva base, llamada base natural[16, 74, 97–99]

$$\sum_{q'K'} \mathcal{N}_{qKq'K'}^\Gamma u_{\lambda;q'K'}^\Gamma = n_\lambda^\Gamma u_{\lambda;qK}^\Gamma \quad (3.121)$$

por lo que los estados ortogonales serán de la forma

$$|\Lambda_\lambda^\Gamma\rangle = \sum_{q'K'} \frac{u_{\lambda;q'K'}^\Gamma}{\sqrt{n_\lambda^\Gamma}} P_{MK}^J \hat{P}^N \hat{P}^Z \hat{P}^\pi |\phi(q)\rangle \quad (3.122)$$

donde se impone un umbral en el mínimo valor numérico de los autovalores a incluir

$n_\lambda^\Gamma$ , del orden o inferior a  $n_\lambda^\Gamma > 10^{-10}$ . Así, si se añaden autovalores más pequeños puede entenderse como la inclusión de dependencia lineal en la base natural que produce inestabilidades numéricas, por lo que se suele vigilar que la convergencia de la energía del estado  $J_\sigma^\pi$  presente una estabilidad a modo de *plateau*. En definitiva, los estados GCM serán ahora combinación lineal de los estados de la base,

$$|\Psi_\sigma^\Gamma\rangle = \sum_\lambda G_{\sigma;\lambda}^\Gamma |\Lambda_\lambda^\Gamma\rangle \quad (3.123)$$

por lo que la ecuación HWG queda finalmente

$$\sum_{\lambda'} \langle \Lambda_{\lambda'}^\Gamma | \hat{H} | \Lambda_\lambda^\Gamma \rangle G_{\sigma;\lambda}^\Gamma = E_\sigma^\Gamma G_{\sigma;\lambda}^\Gamma \quad (3.124)$$

donde  $E_\sigma^\Gamma$  nos daría el espectro de energías y  $G_{\sigma;\lambda}^\Gamma$  se utilizan para evaluar las funciones de onda colectivas, lo que permite conocer la relevancia de cada punto de la malla en el estado  $J_\sigma^\pi$  y, además, para obtener valores medios de operadores entre estados GCM. Así, los pesos de cada punto de la malla de estados intrínsecos pueden evaluarse según la expresión [16, 19]

$$|F_\sigma^\Gamma(q)|^2 = \left| \sum_{K\lambda} G_{\sigma;\lambda}^\Gamma u_{\lambda;qK}^\Gamma \right|^2 \quad (3.125)$$

que referiremos habitualmente como funciones de onda colectivas (*collective wave functions*, c.w.f.).

Una vez definida la base natural de estados dada la expresión (3.126), podemos obtener el valor medio de cualquier operador simplemente calculando[97]

$$\langle \Psi_\sigma^\Gamma | \hat{O} | \Psi_{\sigma'}^{\Gamma'} \rangle = \sum_{\lambda\lambda'} \sum_{qKq'K'} \left( G_{\sigma;\lambda}^\Gamma \frac{u_{\lambda;qK}^\Gamma}{\sqrt{n_\lambda^\Gamma}} \right)^* \langle \Phi^\Gamma(q) | \hat{O} | \Phi^{\Gamma'}(q') \rangle \left( G_{\sigma';\lambda'}^{\Gamma'} \frac{u_{\lambda';q'K'}^{\Gamma'}}{\sqrt{n_{\lambda'}^{\Gamma'}}} \right) \quad (3.126)$$

siendo  $|\Phi^\Gamma\rangle$  el estado proyectado al conjunto de números cuánticos  $\Gamma$ . Según el operador que estemos tratando, nos interesará conocer el valor medio entre estados con el mismo  $\Gamma$  y  $\sigma$ , como en el caso del radio cuadrático medio –lo que permite una comparación directa entre teoría y experimento– o las transiciones EM entre distintos estados rotacionales, que requiere estados con distinto  $J_f$  y  $J_i$ . En el caso de

querer describir otros tipos de transiciones, también podrán hallarse los elementos de matriz reducidos – indispensables para las transiciones  $\beta$  o  $\beta\beta$  sin neutrinos– gracias al Teorema de Wigner-Eckart.

### 3.4.2. Algunos observables de interés

A la hora de evaluar la bondad de la aproximación PGCM se suele analizar el valor medio de algunos observables que indiquen que la convergencia del método es la adecuada. A continuación se presentan los más habituales.

#### Números de protones y neutrones

Teniendo en cuenta la definición de los operadores de protones (neutrones) en segunda cuantización:

$$\hat{N}_{\pi(\nu)} = \sum_{ab} \left( \hat{N}_{\pi(\nu)} \right)_{ab} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_b \quad (3.127)$$

cuyos elementos de matriz en la base del oscilador son, sencillamente

$$\left( \hat{N}_{\pi(\nu)} \right)_{ab} = \delta_{m_{t_a, \pi(\nu)} m_{t_b, \pi(\nu)}} \quad (3.128)$$

Así, con el formalismo expuesto anteriormente, se puede llegar a la expresión del valor esperado entre estados proyectados:

$$\begin{aligned} \langle \Phi^\Gamma(q) | \hat{N}_{\pi(\nu)} | \Phi^{\Gamma'}(q') \rangle &= \frac{2J+1}{16\pi^2} \frac{1}{L_Z L_N} \sum_{l_Z=1}^{L_Z} \sum_{l_N=1}^{L_N} e^{i\varphi_{l_N} N} e^{i\varphi_{l_Z} Z} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K} d\alpha \cdot \\ &\cdot \int_0^{2\pi} e^{i\gamma K'} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{KK'}^J(\beta) \text{Tr} [N_{\pi(\nu)} \rho^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q')] n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \end{aligned} \quad (3.129)$$

que, solo es válido en el caso de estar evaluando el valor medio entre dos estados –final e inicial– que presenten el mismo número de protones y neutrones, junto con el resto de número cuánticos, esto es,  $\Gamma = \Gamma'$ .

### Números de ocupación

Indican cuántas partículas están ocupando una capa determinada. Para una capa  $\alpha$ , el operador número de ocupación se define como

$$\hat{n}_\alpha = \sum_{ab} (\hat{n}_\alpha)_{ab} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_b \quad (3.130)$$

donde los índices  $a, b$  barren los  $2j+1$  estados de cada capa del hamiltoniano escogido. Los elementos de matriz  $\hat{N}_{ab}$  en la base de nuestro espacio de configuración serán simplemente

$$(\hat{n}_\alpha)_{ab} = \delta_{n_a n_b} \delta_{l_a l_b} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{j_a} m_{j_b}} \delta_{m_{t_a} m_{t_b}} \quad (3.131)$$

por lo que la obtención del valor esperado entre estados proyectados y estados GCM es de fácil implementación, pues el operador no es más que la matriz identidad. La utilidad de este observable reside, dentro del marco PGCM, en poder valorar cómo afectan los distintos grados de libertad a la ocupación y desocupación de las distintas capas.

El valor esperado entres estados proyectados se obtendrá de modo similar al número de partículas, por lo que se omite la expresión correspondiente. Nótese que también debe cumplirse la condición  $\Gamma = \Gamma'$ .

### Momento angular total

Otro valor medio que permite analizar la fiabilidad de los resultados PGCM es evaluar si las funciones de onda de muchos cuerpos obtenida al proyectar a buen momento angular son verdaderamente autovectores de  $\hat{J}^2$ . En este caso, será necesario evaluar el solape del operador

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2 \quad (3.132)$$

que, denotando de forma genérica con el subíndice  $i = x, y, z$ , en segunda cuantización vendrán dados por

$$\hat{J}_i^2 = \sum_{abcd} (J_i)_{ab} (J_i)_{cd} \hat{c}_a^\dagger \hat{c}_b \hat{c}_c^\dagger \hat{c}_d \quad (3.133)$$

Así, el solape en este caso, se puede demostrar que adquiere la siguiente forma

$$\langle \Phi^\Gamma(q) | \hat{J}_i^2 | \Phi^{\Gamma'}(q') \rangle = \frac{2J+1}{16\pi^2} \frac{1}{L_Z L_N} \sum_{l_Z=1}^{L_Z} \sum_{l_N=1}^{L_N} e^{i\varphi_{l_N} N} e^{i\varphi_{l_Z} Z} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K} d\alpha \cdot \int_0^{2\pi} e^{i\gamma K'} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{KK'}^{J*}(\beta) n(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \mathcal{J}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') \quad (3.134)$$

siendo

$$\mathcal{J}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') = \sum_i (\text{Tr} [(J_i) \rho^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q')])^2 + \text{Tr}[(J_i)^2 \rho^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') - (J_i \rho^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q'))^2 + (J_i^T \kappa^{10\dagger}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q') J_i \kappa^{10}(\Omega, \vec{\varphi}, \pi, q, q'))] \quad (3.135)$$

donde, para que el observable tenga sentido,  $\Gamma = \Gamma'$ . Además, los elementos de matriz de los operadores  $x$  e  $y$  se obtienen –como se mencionó en la sección anterior– según la actuación de los operadores escalera. Los elementos de matriz de dichos operadores en la base del oscilador vienen dados por

$$(J_+)_{ab} = \sqrt{j_b(j_b+1) - m_{j_b}(m_{j_b}+1)} \delta_{n_a n_b} \delta_{l_a l_b} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{j_a} m_{j_b}+1} \delta_{m_{t_a} m_{t_b}} \quad (3.136a)$$

$$(J_-)_{ab} = \sqrt{j_b(j_b+1) - m_{j_b}(m_{j_b}-1)} \delta_{n_a n_b} \delta_{l_a l_b} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{j_a} m_{j_b}-1} \delta_{m_{t_a} m_{t_b}} \quad (3.136b)$$

### Transiciones electromagnéticas

Las probabilidades de transición reducidas vienen dadas por las expresiones[16]

$$B(E\lambda, J_i \sigma_i \rightarrow J_f \sigma_f) = \frac{1}{2J_i+1} |\langle \Psi_{\sigma_f}^{\Gamma_f} | \hat{Q}_\lambda | \Psi_{\sigma_i}^{\Gamma_i} \rangle|^2 \quad (3.137)$$

$$B(M\lambda, J_i \sigma_i \rightarrow J_f \sigma_f) = \frac{1}{2J_i+1} |\langle \Psi_{\sigma_f}^{\Gamma_f} | \hat{M}_\lambda | \Psi_{\sigma_i}^{\Gamma_i} \rangle|^2 \quad (3.138)$$

donde  $\hat{Q}_{\lambda\mu}$  y  $\hat{M}_{\lambda\mu}$  son los operadores multipolar eléctrico y magnético respectivamente, definidos en el apéndice A. Además, utilizando el teorema de Wigner-Eckart[100, 101], podemos relacionar el elemento de matriz reducido de las expresio-

nes anteriores con el valor esperado entre funciones de onda GCM, esto es,

$$B(E\lambda, J_i\sigma_i \rightarrow J_f\sigma_f) = \frac{1}{\langle J_i M_i \lambda \mu | J_f M_f \rangle} \langle \Psi_{\sigma_f}^{\Gamma_f} | \hat{Q}_{\lambda\mu} | \Psi_{\sigma_i}^{\Gamma_i} \rangle^2 \quad (3.139)$$

$$B(M\lambda, J_i\sigma_i \rightarrow J_f\sigma_f) = \frac{1}{\langle J_i M_i \lambda \mu | J_f M_f \rangle} \langle \Psi_{\sigma_f}^{\Gamma_f} | \hat{M}_{\lambda\mu} | \Psi_{\sigma_i}^{\Gamma_i} \rangle^2 \quad (3.140)$$

siendo  $\langle JM\lambda\mu | JM \rangle$  el coeficiente de Clebsh-Gordan correspondiente. Los valores esperados que aparecen en la expresión implican el cálculo del solape entre los estados proyectados a distintos momentos angulares. Dichos desarrollos se muestran en el apéndice A.

Además, estos operadores también nos permiten hallar los valores esperados de los momentos cuadrupolares eléctricos y dipolares magnéticos, simplemente imponiendo  $J = J_f = J_i$  y utilizando

$$Q_{sp}(J) = \sqrt{\frac{16\pi}{5}} \begin{pmatrix} J & 2 & J \\ -J & 0 & J \end{pmatrix} \langle \Psi_{\sigma}^J | \hat{Q}_{20} | \Psi_{\sigma}^J \rangle \quad (3.141)$$

$$\mu(J) = \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \begin{pmatrix} J & 1 & J \\ -J & 0 & J \end{pmatrix} \langle \Psi_{\sigma}^J | \hat{M}_{10} | \Psi_{\sigma}^J \rangle \quad (3.142)$$

que dependen explícitamente del símbolo 3-j correspondiente. La importancia de estas magnitudes reside en que son de naturaleza espectroscópica y, por tanto, nos permiten comparar los valores teóricos con los obtenidos experimentalmente.

### Transiciones $\beta$ permitidas

Si obviamos el proceso de captura electrónica, se distinguen dos tipos de desintegraciones  $\beta$ [102]. Si en el proceso se emite un electrón, se dice que la desintegración es  $\beta^-$

$${}^A_Z X_N \rightarrow {}^A_{Z+1} X_{N-1} + e^- + \bar{\nu}_e \quad (3.143)$$

mientras que si se emite un positrón, se dice que una desintegración  $\beta^+$

$${}^A_Z X_N \rightarrow {}^A_{Z-1} X_{N+1} + e^+ \nu_e \quad (3.144)$$

En una transición permitida el sistema electrón-neutrino tiene un momento an-

gular orbital 0 y, dado que ambas partículas tienen espín 1/2, el espín total podrá acoplarse a 0 ó 1. En el primero de los casos se dice que la transición es de Fermi, en cuyo caso, el momento angular total del núcleo no varía, esto es,  $\Delta J = 0$ . En el caso de tener los espines acoplados a  $S = 1$ , se dice que la transición es de tipo Gamow-Teller, y el momento angular podrá variar también en una unidad, esto es  $\Delta J = 0, \pm 1$ <sup>7</sup>. En cualquier caso, la paridad del sistema no varía.

De igual modo que en las transiciones EM, se pueden definir las probabilidades de transición reducidas, las cuales son necesarias para el cálculo de tiempos de vida media, periodos de semidesintegración y demás propiedades, típicas del estudio de la radiactividad. Llamando a las probabilidades de desintegración  $B_F, B_{GT}$  y a los elementos de matriz reducidos  $M_F, M_{GT}$ , entonces[32, 102]

$$B_F(J_i\sigma_i \rightarrow J_f\sigma_f) = \delta_{J_i J_f} g_V^2 \frac{|M_F|^2}{2J_i + 1} \quad (3.145)$$

$$B_{GT}(J_i\sigma_i \rightarrow J_f\sigma_f) = g_A^2 \frac{|M_{GT}|^2}{2J_i + 1} \quad (3.146)$$

siendo las constantes de acoplo vector y axial-vector  $g_V = 1$  y  $g_A \approx -1.251$ . De este modo, para el cálculo los elementos de matriz reducidos, es necesario hallar el valor esperado de los operadores de las transiciones de Fermi y Gamow-Teller[103], que en nuestro caso será entre estados GCM. Esto es,

$$M_F \equiv \langle \Psi_{\sigma_f}^J || \hat{M}_{F\pm} || \Psi_{\sigma_i}^J \rangle \quad (3.147)$$

$$M_{GT} \equiv \langle \Psi_{\sigma_f}^{J_f} || \hat{M}_{GT\pm} || \Psi_{\sigma_i}^{J_i} \rangle \quad (3.148)$$

donde el subíndice  $\pm$  se refiere a ambas desintegraciones  $\beta^\pm$  y la etiqueta de momento angular sirve para denotar que en la transición de Fermi se debe cumplir que  $J_f = J_i$ . Sin embargo, uno de los aspectos fundamentales de la obtención de estas cantidades es que las funciones de onda PGCM final e inicial se refieren a dos núcleos distintos. En el apéndice B se muestra la obtención analítica de los solapes teniendo en cuenta la diferencia en el número de partículas de ambos estados.

<sup>7</sup>Excepto para  $0^+ \rightarrow 0^+$  que es siempre tipo Fermi.



La importancia de estas dos últimas cantidades reside en la conexión con el experimento. En efecto, los periodos de semidesintegración se pueden obtener mediante la expresión[102],

$$t_{1/2} = \frac{\kappa}{f_0 (B_F + B_{GT})} \quad (3.149)$$

siendo  $\kappa = 6147$  s y  $f_0$  es una constante asociada al espacio de fases que contiene la cinemática de los leptones involucrados en la desintegraciones.

Así, habitualmente se suelen clasificar las desintegraciones[104–106] según el valor

$$\log ft = \log (f_0 t_{1/2}) \quad (3.150)$$

por lo que se podrá comparar el resultado aproximado PGCM con los datos experimentales de vidas medias.

### Transiciones $0\nu\beta\beta$

Al igual que en caso de la desintegración  $\beta$ , la obtención de los tiempos de semi-desintegración de este proceso –más allá del modelo estándar– implica el cálculo de los elementos de matriz nucleares de esta desintegración[107]:

$$\left[ T_{1/2}^{0\nu\beta\beta} \right]^{-1} = G_{01} |M_{tot}^{0\nu}|^2 \left( \frac{\langle m_{\beta\beta} \rangle}{m_e} \right)^2 \quad (3.151)$$

donde  $G_{01}$  es el factor del espacio de fases asociado a la cinemática de los leptones involucrados[108],  $m_e$  la masa del electrón,  $\langle m_{\beta\beta} \rangle$  la masa efectiva de los neutrinos de Majorana[109] y  $|M_{tot}^{0\nu}|$  es el valor medio del mencionado elemento de matriz nuclear total, cuyo operador viene dado por

$$\hat{M}_{tot}^{0\nu} = - \left( \frac{g_V}{g_A} \right)^2 \hat{M}_F^{0\nu} + \hat{M}_{GT}^{0\nu} + \hat{M}_T^{0\nu} \quad (3.152)$$

donde aparecen los operadores a dos cuerpos de Fermi, Gamow-Teller y tensorial respectivamente y  $(g_V/g_A) \approx 1.25^2$  es la proporción entre las constante de acoplo vector y axial-vector asociadas a la interacción electrodébil. Además, el signo del término tensorial, suele variar según los autores[110, 111], si bien podemos ignorar este hecho, dado que la contribución de éste es pequeña en comparación con el de

Fermi y Gamow-Teller.

Si se tiene en cuenta el estado asociado al núcleo intermedio en la desintegración a través de la relación de cierre  $E_k - (E_i + E_f)/2 \rightarrow \langle E \rangle$ [112], donde  $\langle E \rangle \approx 2,5$  MeV, los elementos de matriz asociados a los distintos términos pueden ser calculados teniendo en cuenta simplemente el estado inicial (“abuelo”) y final (“nieto”). Así, los tres términos vienen dados por[113]:

$$M_F^{0\nu} = \langle f | \sum_{kl} \hat{\tau}_k^- \hat{\tau}_l^- H_F | i \rangle \quad (3.153)$$

$$M_{GT}^{0\nu} = \langle f | \sum_{kl} \hat{\tau}_k^- \hat{\tau}_l^- \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l H_{GT} | i \rangle \quad (3.154)$$

$$M_T^{0\nu} = \langle f | \sum_{kl} \hat{\tau}_k^- \hat{\tau}_l^- [3\hat{\sigma}_j \cdot \hat{r}_{kl} \hat{\sigma}_i \cdot \hat{r}_{kl} - \hat{\sigma}_k \hat{\sigma}_l] H_T | i \rangle \quad (3.155)$$

donde los estados final e inicial difieren en  $\pm 2$  nucleones (bien en protones o bien en neutrones) y  $H_\alpha$  con  $\alpha = F, GT, T$  es la parte radial del potencial de intercambio de neutrinos ligeros, tal que

$$H_\alpha = \frac{2R}{\pi g_A^2} \int_0^\infty q dq \frac{j_{0/2}(qr_{kl}) h_\alpha(q)}{q + \langle E \rangle} \quad (3.156)$$

donde  $R = r_0 A^{1/3}$  es el radio nuclear,  $j_0$  y  $j_2$  son las funciones de Bessel para los elementos de matriz de Fermi o Gamow-Teller y para el término tensorial, respectivamente, y  $h_\alpha$  son funciones dependientes del momento de los neutrinos ( $q$ ) y la masa de los piones ( $m_\pi$ ), entre otros.

### 3.5. Un ejemplo de aplicación

Para ilustrar las técnicas expuestas a lo largo de este capítulo, a continuación se muestra la aplicación del formalismo PGCM en un caso no trivial dentro del espacio de valencia dado por la capa *sd*. El núcleo escogido es el isótopo  $^{26}\text{Ne}$ , que presenta 2 protones y 8 neutrones activos la interacción empleada es la USD[34]. Si bien en capítulos posteriores se analizará el efecto de romper diferentes simetrías en las funciones de onda intrínsecas, por simplicidad utilizaremos semillas axiales que

preservan la estructura de tipo producto de protones y neutrones de forma separada.

### 3.5.1. Obtención de los estados intrínsecos

En ausencia de ligaduras en los parámetros de deformación, el método HFB encuentra dos vacíos de cuasipartícula que satisfacen la condición de mínimo local. El primero de estos, situado en  $\beta_2 = -0.06^8$  (deformación oblada), con una energía total de -76.64 MeV, mientras que el segundo se encuentra en  $\beta_2 = 0.14$  (deformación prolada) con -77.11 MeV, siendo este último el mínimo global.

En el caso de minimizar el funcional PNVAP, la situación vuelve a repetirse. Si bien la posición de ambos mínimos varía ligeramente respecto del cálculo HFB, ahora los mínimos oblado y prolado presentan unas energías totales de -78.04 y -78.60 MeV, respectivamente.

Así, para visualizar las superficies de energía total en función de la deformación, impondremos ligaduras en los parámetros  $(\beta_2, \gamma)$ , fijando el último de los dos a 0 y  $180^\circ$  para explorar las deformaciones proladas y obladas, respectivamente. En la Fig. 3.2 se muestran las energías total y de apareamiento  $pp$  y  $nn$  para los estados intrínsecos que satisfacen distintas deformaciones axiales obtenidos con HFB y PNVAP. Cabe destacar que, dado el reducido tamaño del espacio de valencia, no es posible deformar el sistema todo lo que se desee. Así, a partir de ciertos valores en  $\beta_2$ , el cálculo no es capaz de converger. En este caso de estudio, donde el valor de paso se ha fijado a 0.1, se ha encontrado que los estados obtenidos con la minimización HFB no exceden deformaciones mayores a  $\beta_2 = 0.18$  en los extremos prolado y oblado, mientras que con el método PNVAP, el extremo prolado llega hasta 0.20, manteniéndose el mismo valor de 0.18 en la zona de deformaciones negativas.

En cuanto a las energías totales, vemos en primer lugar que el método PNVAP produce una curva de menor energía en casi todo el intervalo de  $\beta_2$ , siendo inferiores las diferencias en los extremos. Además, con esta minimización se ha alcanzado un mayor grado de deformación prolada en comparación con el caso HFB. En cualquier caso, ambos métodos describen el mismo comportamiento cualitativo. Fenomenología similar puede encontrarse también en las energías de apareamiento, donde vemos que

---

<sup>8</sup>Las deformaciones obtenidas se refieren al conjunto de nucleones considerados en el espacio de valencia, por lo que no deben tratarse como la deformación total del núcleo de estudio.

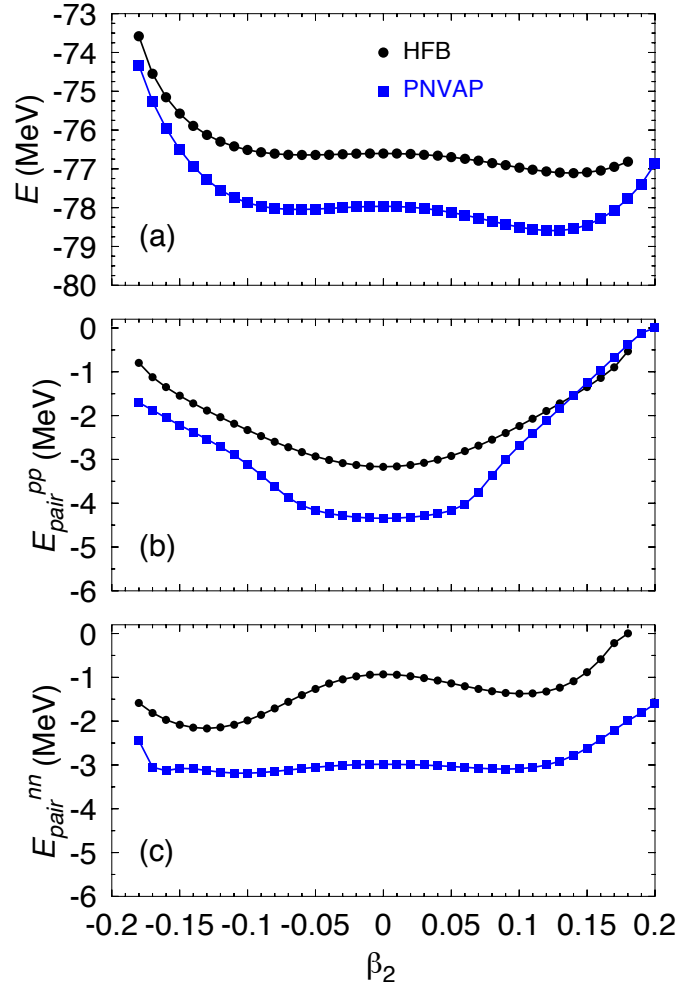


Figura 3.2: Energía (a) total y de apareamiento (b) protón-protón y (c) neutrón-neutrón en función del parámetro deformación axial  $\beta_2$  obtenidas con las minimizaciones HFB y PNVAP para el núcleo  $^{26}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 8$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

la proyección a buen número de partículas incluye una mayor cantidad de correlaciones en casi todos los estados. Cabe destacar, sin embargo, que en el extremo prolado la energía de apareamiento  $pp$  es ligeramente inferior (en valor absoluto).

### 3.5.2. Proyección a buen momento angular y número de partículas

Una vez obtenida la malla de funciones de onda intrínsecas, evaluamos el efecto de restaurar las simetrías de momento angular y número de partículas. Dado que se preserva la simetría axial, la integración sobre los ángulos de Euler puede hallarse con la reducción dada por la expresión (3.117), lo que reduce considerablemente el tiempo de cálculo en comparación con el caso generalmente triaxial. Los puntos de integración, al igual que en el resto de este trabajo, se han escogido de tal modo que se ha asegurado la convergencia del número de partículas y del momento angular total. Además, los estados intrínsecos satisfacen buena paridad por lo que se obvia la proyección a esta simetría.

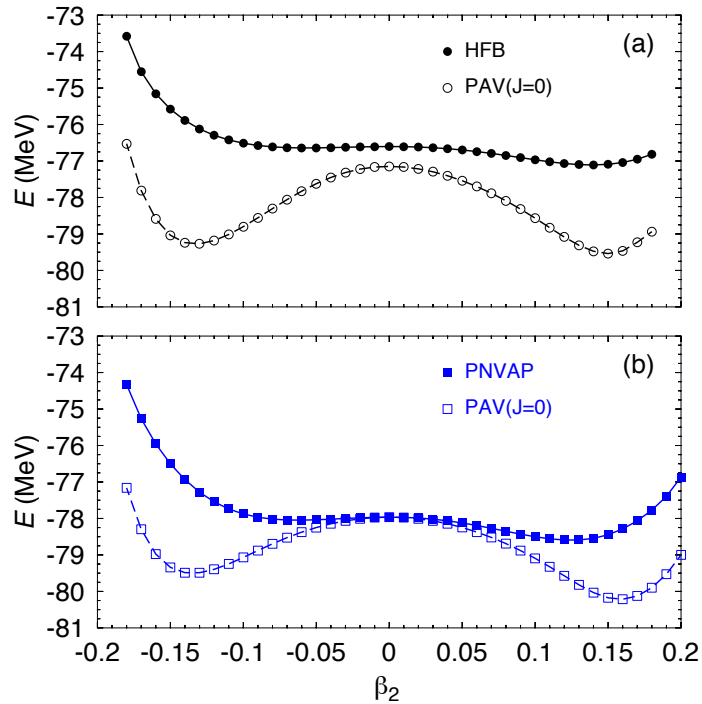


Figura 3.3: Curvas de energía total en función de  $\beta_2$  utilizando estados intrínsecos axiales obtenidos con (a) HFB y (b) PNVAP antes y después de proyectar a buen número de partículas y  $J = 0$  para el núcleo  $^{26}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 8$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

En los paneles (a) y (b) de la Fig. 3.3 se muestran las curvas de energía total proyectada a  $J = 0$  en función del parámetro de deformación cuadrupolar  $\beta_2$  para los estados obtenidos con HFB y PNVAP, respectivamente. Además, se han incluido las superficies de energía HFB y PNVAP para poder comparar el efecto de la proyección en ambos casos.

En ambos casos, se observa que la proyección a buen número de partículas y  $J = 0$  remarca la existencia de dos mínimos locales en las zonas oblada y prolada, en comparación con las curvas obtenidas con los métodos HFB y PNVAP. Dichos mínimos, además, se encuentran ligeramente desplazados hacia los extremos de  $\beta_2$ , siendo el mínimo oblado el que sufre una mayor variación. En efecto, a modo de ejemplo, en el caso PNVAP, el mínimo pasa de ser el estado con  $\beta_2 = -0.6$  a aquel que cumple  $\beta_2 = -0.13$ . Además, vemos que para todos los puntos de la malla, la proyección permite una ganancia significativa de energía en comparación con el puro HFB/PNVAP. A modo de ejemplo, el mínimo prolado PNVAP, situado a  $-78.60$  MeV, una vez proyectado al momento angular del estado fundamental, presenta un valor de  $-80.21$  MeV. En el caso de considerar la curva HFB, esta ganancia es algo superior, dado que la proyección a buen número de partículas se está considerando ahora por primera vez.

Sin embargo, en la región con valores de  $\beta_2$  cercanos a 0 vemos que la curva PNVAP presenta el mismo valor (o muy cercano) que la energía proyectada. La justificación es doble: dado que se han minimizado funciones de onda que satisfacen buen número de partículas, la proyección a  $N, Z$  ya está incluida y no supone ninguna ganancia de energía. Además, la proyección a  $J = 0$  del estado esférico tampoco produce efecto alguno, pues el estado intrínseco ya satisfacía la simetría rotacional. En el caso de los estados alrededor de este punto, la proyección supone una leve disminución del orden de pocos keV. En el caso HFB, por tanto, las diferencias de energía en el estado esférico deben atribuirse únicamente a la ruptura de la simetría del número de partículas y su posterior restauración.

Dado que las funciones de onda preservan la simetría axial, solo podremos describir estados con momento angular par con  $K = 0$ . Analizamos ahora, por tanto, la descripción de los siguientes estados excitados de menor energía mediante la proyección a  $J = 2, 4$ . En la Fig. 3.4 se muestran las curvas de energía total con  $J = 0, 2, 4$

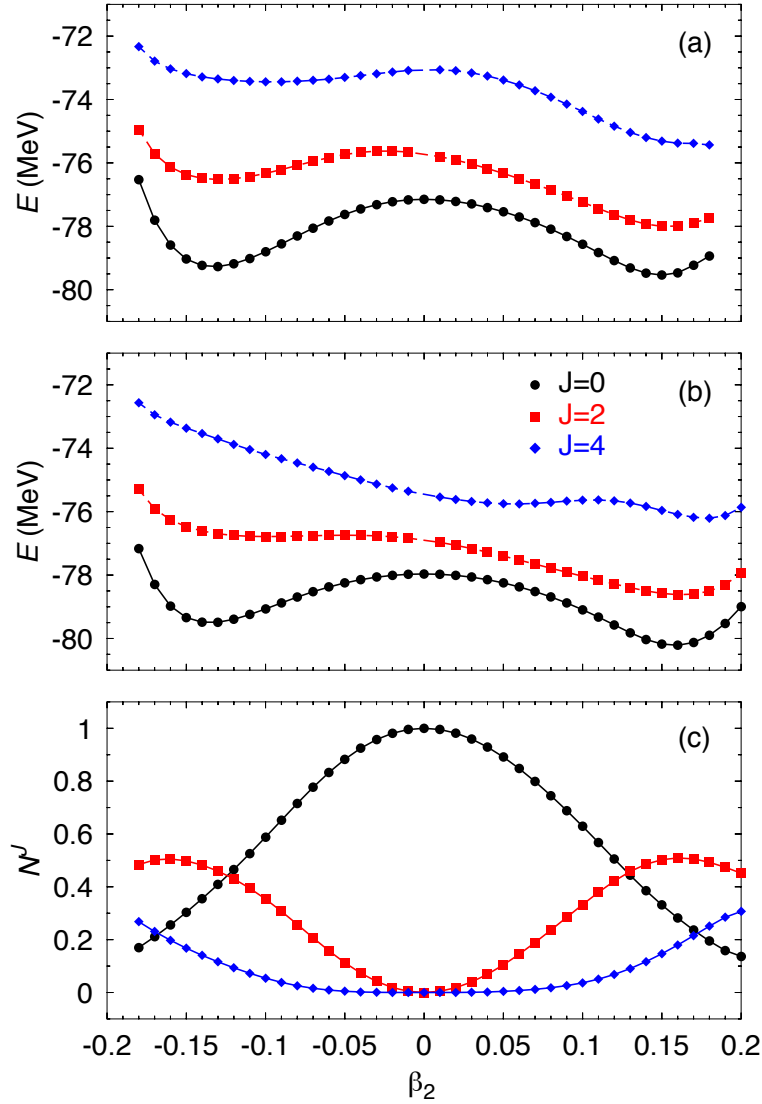


Figura 3.4: Curvas de energía total proyectadas a buen número de partículas y  $J = 0, 2, 4$  utilizando estados intrínsecos axiales obtenidos con (a) HFB y (b) PNVAP; (c) distribución de la norma proyectada a  $J = 0, 2, 4$  entre estados PNVAP para el núcleo  $^{26}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 8$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

para el conjunto de estados HFB en el panel (a), y PNVAP en el panel (b). Además, en el panel (c) se incluye el solape de la norma entre estados proyectados para el último de los dos casos anteriores (los resultados con estados HFB son prácticamente idénticos), esto es,

$$\mathcal{N}^J(\beta_2) = \langle \phi(\beta_2) | \hat{P}_{00}^J | \phi(\beta_2) \rangle \quad (3.157)$$

Como era de esperar, vemos que los estados de la malla con  $\beta_2 = 0$  no presentan componente en otros valores de momento angular distinto de 0. Esto se observa en el panel (c) donde los pesos para los estados  $J = 2, 4$  son nulos en la región cercana a la simetría esférica, por lo que el teorema de Wick no puede aplicarse en dichos puntos. En cuanto a las curvas de energía correspondientes, vemos que el caso PNVAP presenta mayor suavidad frente a las que toman estados intrínsecos HFB. Además, para  $J = 2$  ambos casos describen cualitativamente el mismo comportamiento, presentando de nuevo dos mínimos en los mismos puntos la curva con  $J = 0$ . Sin embargo, la principal diferencia la encontramos en la curva  $J = 4$  al usar el método PNVAP, donde –ver panel (b) de la Fig. 3.4– el mínimo oblado desaparece y se observa únicamente un mínimo prolado bien definido.

### 3.5.3. Mezcla de configuraciones. Resolución de la ecuación de HWG y propiedades EM

Gracias a la restauración de la simetría rotacional y del número de partículas se han incluido un mayor número de correlaciones, si bien la degeneración obtenida en las curvas de energía total indican que la mezcla de configuraciones puede ayudar a reducir todavía más la energía del estado fundamental y del resto de estados excitados. Para el caso HFB se han incluido 37 funciones de onda intrínsecas, mientras que para PNVAP la malla se compone de 35 estados.

En la Fig. 3.5 se muestra el valor de la energía PGCM, fruto de resolver la ecuación de HWG para los estados  $J_\sigma^\pi = 0_1^+, 2_1^+, 4_1^+$  según se incluyen un mayor número de autovalores en la base natural para los dos tipos de mallas de estados (HFB/PNVAP). En primer lugar, se observa que la malla de estados PNVAP presenta un mayor número de autoestados en la base natural,  $\lambda$ , por encima del umbral, fijado a  $10^{-10}$ . En ambos casos se observa un comportamiento de *plateau* bien definido, si bien es posible que la inclusión de autovalores de menor valor introduzcan ruido numérico. En cuanto al número de autoestados ortogonales obtenidos, no se observa gran diferencia entre el conjunto de estados intrínsecos HFB y PNVAP. En



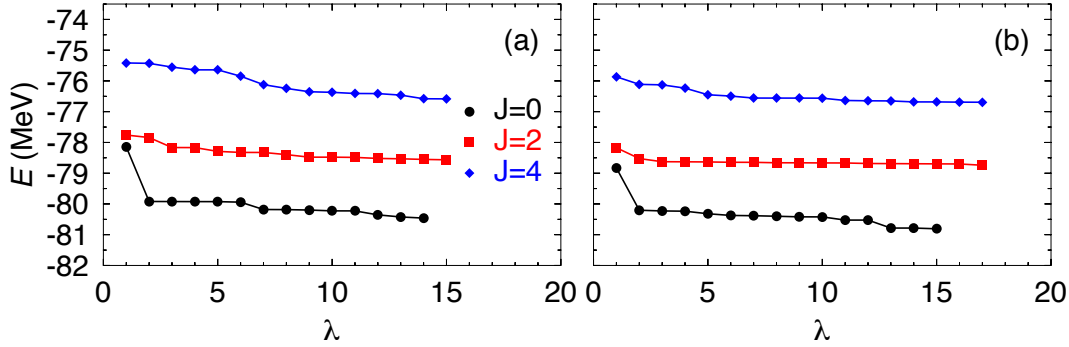


Figura 3.5: Energía PGCM en función del número de autovalores en la base natural para los estados  $J_\sigma^\pi = 0_1^+, 2_1^+, 4_1^+$  con estados intrínsecos obtenidos con (a) HFB y (b) PNVAP para el núcleo de  $^{26}\text{Ne}$ .

efecto, el grado de independencia lineal entre los estados intrínsecos dependerá de otros factores, tales como el tamaño del espacio de valencia, los grados de libertad explorados o la discretización de estos.

Con lo anterior, el estado fundamental  $0_1^+$  obtenido con el primer conjunto de estados HFB ha sido de  $-80.46$  MeV, mientras que para el conjunto PNVAP de  $-80.81$  MeV. A modo de resumen, en el Cuadro 3.2 se muestran las energías mínimas obtenidas con puro HFB/PNVAP, con proyección a buenos números cuánticos y realizando la mezcla de configuraciones, así como la diferencia respecto de la energía dada por el cálculo de modelo de capas. Como se ha podido ver, la mejor aproximación a la energía obtenida con la diagonalización completa del hamiltoniano ( $-81.63$  MeV) ha sido la mezcla de configuraciones utilizando una malla de funciones de onda intrínsecas obtenidas con PNVAP, estando la solución variacional  $820$  keV por encima de la exacta.

Para los siguientes estados excitados de menor energía, el comportamiento encontrado es similar al del estado fundamental. Así, las energías PGCM que toman estados obtenidos con PNVAP se encuentran siempre por debajo de las HFB. Además, si se representan las energías de excitación  $-E(J_\sigma^\pi) - E(0_1^+)$  obtenidas con ambos métodos junto con las energías obtenidas con la diagonalización exacta, vemos que los tres estados con  $\sigma = 1$  se describen de modo similar. Sin embargo, para  $\sigma = 2$ , se observa un claro empobrecimiento, obteniendo energías de excitación superiores

	HFB	PNVAP	$\Delta E$ (HFB)	$\Delta E$ (PNVAP)
$E_{\text{HFB/PNVAP}}^{\text{min}}$	-77.11	-78.60	4.52	3.03
$E_{\text{PNAMP}}^{\text{min}}$	-79.54	-80.21	2.09	1.42
$E_{\text{PGCM}}$	-80.46	-80.81	1.17	0.82

Cuadro 3.2: Resumen de los valores mínimos de la energía del estado fundamental del  $^{26}\text{Ne}$  (expresados en MeV) obtenidos con los métodos HFB/PNVAP, PNAMP y PGCM al considerar las dos minimizaciones HFB y PNVAP para la obtención de los estados intrínsecos. Las dos columnas de la derecha representan la desviación respecto del valor exacto de la energía (expresada en MeV),  $\Delta E = E - E_{\text{ISM}}$ .

en más de 2 MeV en el peor de los casos (ver resultados con  $J = 2$  en la Fig. 3.6). Este hecho, por tanto, indica que la función de onda nuclear PGCM obtenida no incluye las correlaciones adecuadas, por lo que se tendrán que explorar otros grados de libertad para mejorar la calidad de la descripción.

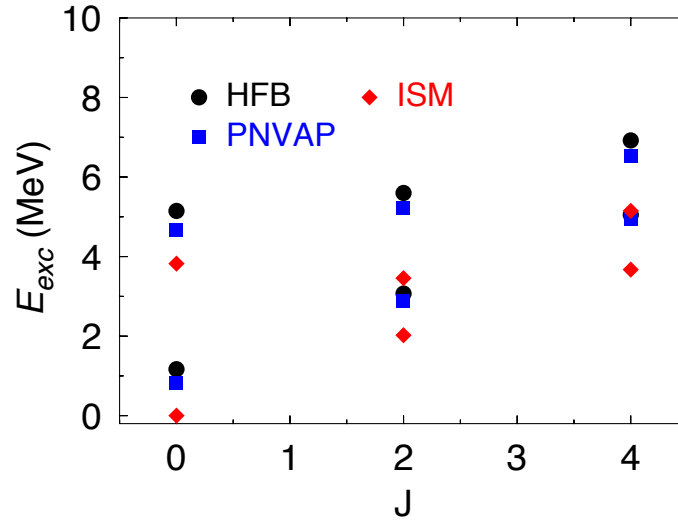


Figura 3.6: Energías de excitación PGCM con estados intrínsecos HFB (puntos negros) y PNVAP (cuadrados azules) e ISM (diamantes rojos) para los estados  $J_\sigma = 0, 2, 4$  con  $\sigma = 1, 2$  para el núcleo de  $^{26}\text{Ne}$ . El origen de energías viene dado por la energía del estado fundamental ISM.

En cuanto a la colectividad de la función de onda nuclear, en la Fig. 3.7 se han representado los pesos –ver expresión (3.125)– en función del parámetro de deformación  $\beta_2$ , para los estados  $J_\sigma^\pi = 0_1^+, 0_2^+, 2_1^+, 4_1^+$ . Dado que no hay gran diferencia entre

los dos esquemas variacionales, se muestran solo los resultados del mejor de estos (estados intrínsecos PNVA). Para el estado fundamental se observa que, prácticamente, todos los estados intrínsecos considerados en la mezcla contribuyen de modo similar, mientras que para el resto de estados excitados surgen picos relevantes en los estados que presentan un alto grado de deformación axial. Además, mientras que para el primer estado excitado con  $J = 2$  se observa una gran suavidad a lo largo de toda la curva, en el estado  $0_2^+$  surgen picos en las deformaciones extremas oblada y prolada, por lo que se deduce que la fluctuación de formas en estos estados toma un papel relevante en la descripción de estos estados. Este comportamiento, además, es habitual encontrarlo cuando se trabaja en espacios de valencia reducidos. Recientemente se ha demostrado que en hamiltonianos exactamente resolubles de dimensiones pequeñas también aparece esta estructura de picos abruptos[114].

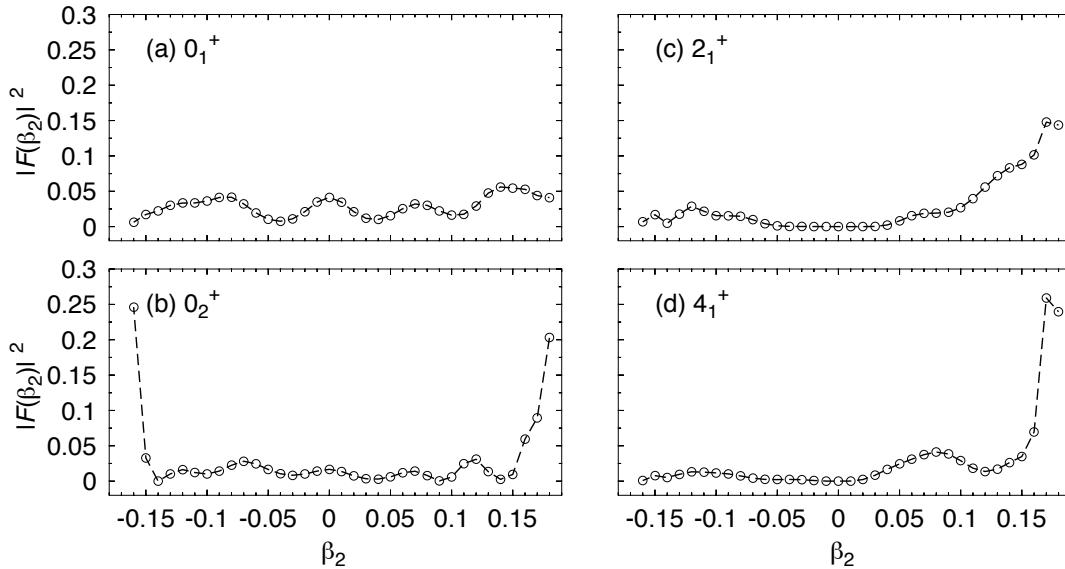


Figura 3.7: Pesos de la función de onda colectiva PGCM con estados PNVA,  $|F(\beta_2)|^2$ , para los estados de menor energía (a)  $0_1^+$ , (b)  $0_2^+$ , (c)  $2_1^+$  y  $4_1^+$  del núcleo  $^{26}\text{Ne}$ .

Por último, para comprobar la calidad descriptiva del método PGCM se han calculado las probabilidades de transición E2 y los momentos eléctricos espectroscópicos asociados a los estados anteriores. Los resultados pueden verse en el Cuadro 3.3, junto los obtenidos con la diagonalización exacta. Para la adecuada comparación,

además, se han considerado las cargas efectivas 1.5 y 0.5 para protones y neutrones, respectivamente. A rasgos generales, vemos que la aproximación axial PGCM describe considerablemente bien las propiedades electromagnéticas del  $^{26}\text{Ne}$  cuando se consideran los estados de más baja energía. En cuanto a los momentos de los estados con  $J = 2$  no solo hay concordancia en el signo<sup>9</sup> si no en el orden de magnitud de dicha cantidad. Del mismo modo, encontramos que las probabilidades de transición  $B(E2)$  también presentan un acuerdo notablemente bueno respecto del valor exacto, si bien las propiedades asociadas al estado  $2_2^+$  presentan diferencias mayores.

$J_{i\sigma_i}^\pi \rightarrow J_{f\sigma_f}^\pi$	$Q(J_{i\sigma_i}^\pi)$	$B(E2; J_{i\sigma_i}^\pi \rightarrow J_{f\sigma_f}^\pi)$
$2_1^+ \rightarrow 0_1^+$	-14.30   -11.87	54.72   51.18
$2_1^+ \rightarrow 0_2^+$		6.45   3.11
$2_2^+ \rightarrow 2_1^+$	-7.11   -2.82	1.83   7.49
$2_2^+ \rightarrow 0_1^+$		2.17   0.57
$2_2^+ \rightarrow 0_2^+$		17.90   6.26

Cuadro 3.3: Probabilidades de transición cuadrupolares eléctricas,  $B(E2)$ , en  $e^2\text{fm}^4$  y momentos,  $Q(J^\pi)$  en  $\text{efm}^2$  calculados con la aproximación PGCM con estados intrínsecos axiales obtenidos con PNVAP (izquierda) y con la diagonalización exacta (derecha) para el  $^{26}\text{Ne}$ .

<sup>9</sup>Momentos cuadrupolares eléctricos espectroscópicos negativos indican que dichos estados presentan una deformación prolada. Hecho que ya se podía vislumbrar con los pesos de las distintas funciones de onda colectivas.



---

## Capítulo 4

# Comparación de resultados PGCM y SM I: cálculos sistemáticos en la capa $sd$

A lo largo de este capítulo se analiza sistemáticamente la capacidad del método PGCM de reproducir la estructura de los diferentes núcleos que pueden ser descritos en el espacio de valencia restringido a las capas  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$  y  $0d_{3/2}$ , abreviado habitualmente como capa  $sd$ . Dado que la interacción escogida es la USD[34], los resultados obtenidos mediante esta aproximación variacional pueden compararse directamente con la diagonalización exacta del hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear, calculados en este trabajo con el código ANTOINE[10, 35, 36].

Así, en aras de la completitud, nos fijaremos en la bondad de las aproximaciones a nivel de campo medio, esto es, funciones de onda HFB; más allá de campo medio, utilizando funciones de onda obtenidas con PNVAP que satisfacen buen número de partículas y el esquema PGCM completo incluyendo la mezcla de estados intrínsecos proyectados a buen momento angular y número de partículas.

También nos detendremos en el papel que juegan las distintas simetrías de los estados intrínsecos, así como en la exploración de los grados de libertad más habituales –esto es, deformaciones cuadrupolares y apareamiento– a la hora de describir los espectros de energía de los diferentes núcleos dentro de esta capa. Como principales novedades que se aportan, cabe destacar la inclusión de estados que mezclan

protones y neutrones así como el empleo de las correlaciones de apareamiento protón-neutrón con  $T = 0, 1$  como coordenadas generadoras del método PGCM. Esto, como se verá a lo largo del capítulo, permitirá la descripción de núcleos de masa par-impar (o impar-par si la interacción preserva la simetría de isospín) e impar-impar, siendo estos últimos poco habituales en los cálculos de estructura nuclear con este formalismo.

## 4.1. Cálculos sin ligaduras

Analizamos en primer lugar los mínimos absolutos HFB y PNVAP obtenidos con diferentes semillas. Considerando que todas satisfacen una transformación de HFB real, se distinguen tres vacíos de cuasipartícula distintos según las simetrías impuestas:

1. axial *pn-no*: semillas axialmente simétricas sin mezcla de protones y neutrones.
2. general *pn-no*: semillas que no preservan la simetría axial pero mantienen la estructura de bloques separados en protones y neutrones.
3. general *pn-yes*: semillas que no preservan la simetría axial y mezclan estados de protones y neutrones.

lo que implica que la estructura de las matrices  $(U, V)$  de la transformación (3.7) se restringe en mayor o menor medida. Además, como ejemplos ilustrativos estudiamos las soluciones obtenidas en tres núcleos distintos:  $^{24}\text{Ne}$  como ejemplo de caso par-par,  $^{25}\text{Ne}$  como caso par-impar y  $^{24}\text{Na}$  como caso impar-impar.

### 4.1.1. Caso par-par: $^{24}\text{Ne}$

Dado que el método que se emplea para resolver las ecuaciones HFB y PNVAP –esto es, el gradiente– es una técnica de optimización a primer orden, el algoritmo no necesariamente debe finalizar en el mínimo absoluto. En efecto, en el caso de existir más de un mínimo local, la elección de la semilla inicial del cálculo y la superficie de energía a explorar toman un papel determinante.

Así, una forma de evitar este problema y asegurar que se alcanza el mínimo global de la superficie, es repetir el cálculo varias veces utilizando semillas que mantengan la estructura de las matrices  $(U, V)$  comentada anteriormente pero que presenten coeficientes aleatorios. En las Fig. 4.1 y 4.2 se muestran los resultados obtenidos al ejecutar el código 650 veces para las ecuaciones HFB y PNVAP respectivamente. Además, el eje X se ha ordenado de tal manera que aparezcan las energías HFB/PNVAP más bajas primero, por lo que no se corresponde necesariamente al orden de ejecución del cálculo. Junto con la energía total HFB/PNVAP se muestran los valores esperados de los operadores de apareamiento y deformaciones de masa cuadrupolares que nos permiten entender mejor los resultados. Si bien es habitual, como ya se ha mencionado en el capítulo anterior, fijar el valor de  $q_{21}$  a cero, se ha permitido que este varíe acorde al proceso de minimización, por lo que también se muestran sus valores esperados obtenidos.

En el caso HFB, al comparar los paneles superiores, observamos que el mínimo absoluto no depende de la elección de la estructura (simetrías autoconsistentes impuestas) de la semilla. En efecto, la semilla axial y las otras dos generalmente triaxiales conducen al mismo mínimo en la energía variacional obtenida. De hecho, estas soluciones no contienen apareamiento tanto  $pn$  (protón-neutrón) en cualquiera de los canales  $T_p = 0, 1$  como  $pp$  (protón-protón) incluso cuando el espacio variacional permite la inclusión de estas correlaciones. Así, solo encontramos correlaciones asociadas a la formación de pares  $nn$  (neutrón-neutrón) distintas de cero.

Cabe destacar, sin embargo, que al emplear semillas axialmente simétricas el cálculo converge en dos mínimos diferentes, asociados a las deformaciones prolada ( $q_{20} > 0$ ) y oblada ( $q_{20} < 0$ ). En cualquier caso, debido a esta simetría los valores esperados  $q_{2\mu}$  con  $\mu = 1, 2$  son nulos para ambos.

En contraste con lo anterior, al utilizar semillas generalmente triaxiales (independientemente de la mezcla  $pn$ ) observamos una mayor eficacia a la hora de alcanzar el mínimo global. Esta eficacia, sin embargo, es a costa de encontrarnos un comportamiento oscilante en el conjunto de valores esperados de la deformación cuadrupolar,  $q_{2\mu}$ . Aún con esto, dichas oscilaciones solo manifiestan que la energía total no depende de la orientación del núcleo respecto del sistema de referencia. En efecto, en los paneles (e) y (i) encontramos que el cálculo finaliza sistemáticamente en el mis-



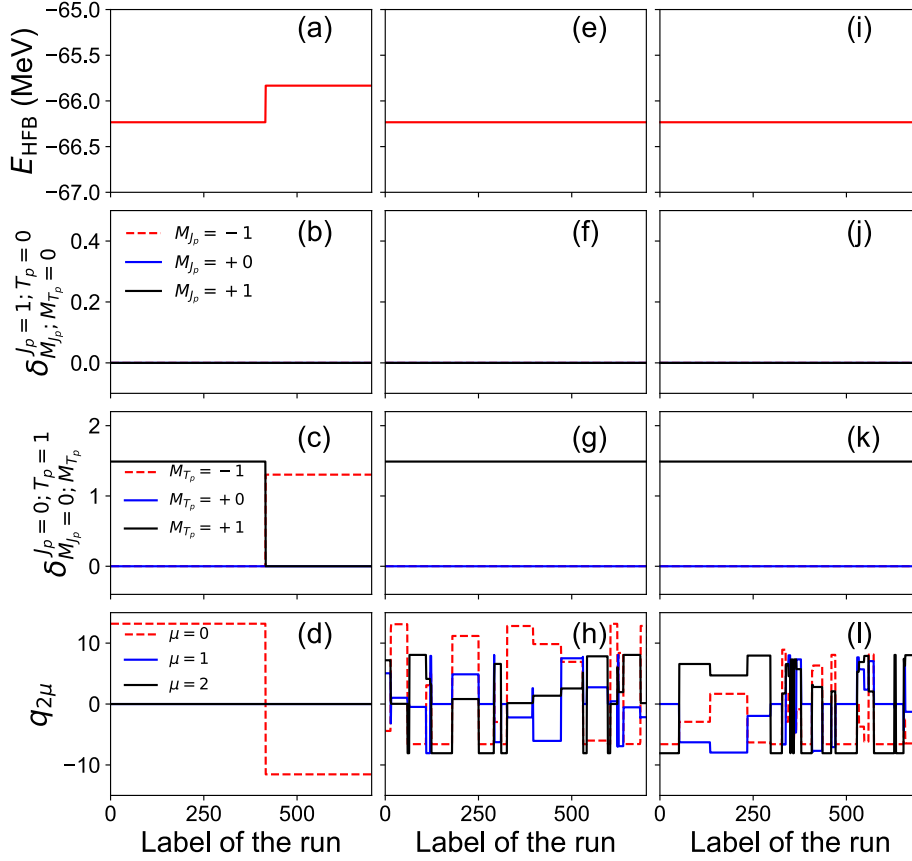


Figura 4.1: Energía HFB total (primera fila), amplitudes de apareamiento isoesca- lar (segunda fila), isovectorial (tercera fila) y momentos cuadrupolares (cuarta fila) obtenidas en 650 soluciones al cálculo HFB sin ligaduras con semillas (a)-(d) axial  $pn$ -no, (e)-(h) general  $pn$ -no y (i)-(l) general  $pn$ -yes para el núcleo  $^{24}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 6$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

mo mínimo de energía HFB, a pesar de la variedad de resultados mostrados en los paneles (h) y (l).

En cuanto a los resultados PNVAP, en primer lugar destaca que la minimización sin mezcla  $pn$  produce de nuevo los mismos resultados en la energía con la misma cantidad de correlaciones de apareamiento. Sin embargo, al contrario que en el caso HFB, aquí surgen las correlaciones  $pp$  y  $nn$  ya que minimizar funciones de onda proyectadas a buen número de partículas es una mejor aproximación variacional. Además, esto evita el colapso espurio de las correlaciones de apareamiento que su-

cede a nivel HFB[12, 16, 115]Esto, por tanto, también se refleja en la energía total obtenida, que se encuentra 1.4 MeV aproximadamente por debajo de los mínimos encontrados en el caso anterior.

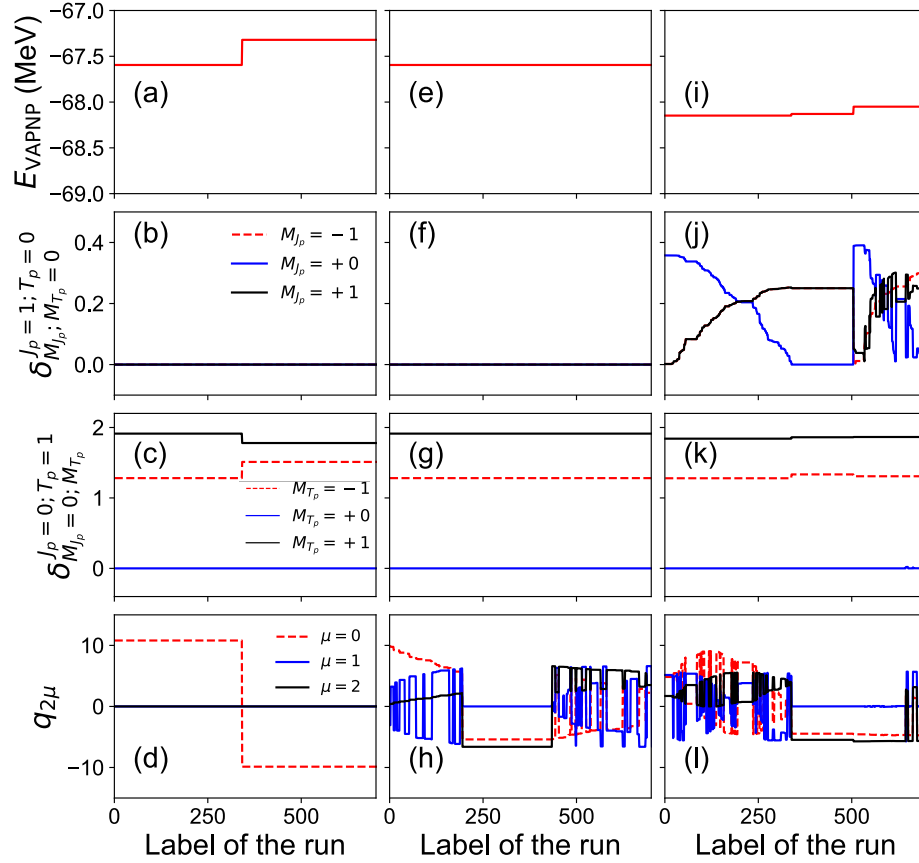


Figura 4.2: Igual que la Fig. 4.1 pero con el método PNVAP.

Cuando se utilizan semillas axiales surgen de nuevo dos mínimos locales asociados a las deformaciones prolada y oblada, siendo el mínimo global el segundo. Dicho estado, además, es el que se obtiene sistemáticamente con las semillas generales sin mezcla  $pn$ , si bien encontramos de nuevo que los parámetros cuadrupolares varían debido a la orientación arbitraria de la función de onda.

Las principales diferencias con respecto al cálculo HFB se observan cuando se considera la semilla que rompe la estructura de bloques separados de protones y neutrones. En primer lugar, se obtienen los estados con menor energía de todo el

conjunto de cálculos. En efecto, mientras que en el método HFB no se introducía un mayor número de correlaciones –a pesar de que el espacio variacional lo permitía– en el caso PNVAP el mínimo global se sitúa ahora a 0.5 MeV aproximadamente del obtenido con la semilla axial. En segundo lugar, en este último caso aparecen un mayor número de correlaciones de apareamiento, debidas tanto a los canales isovectoriales  $pp$ ,  $nn$  como al  $pn$  isoescalar. Además, encontramos dos mínimos adicionales –ver panel (i) de la Fig. 4.2– muy cercanos al absoluto. Por último, tanto los parámetros de deformación,  $q_{2\mu}$  como el apareamiento isoescalar,  $\delta_{M_J p}^{10}$  cambian –nuevamente– debido a la orientación arbitraria de los estados, manteniendo la misma energía total.

Analizamos ahora en más detalle el efecto de incluir las correlaciones de apareamiento descomponiendo las funciones de onda en los autoestados de los operadores de número de protones y neutrones. Para ello, se ha calculado el solape de la norma entre estados proyectados a buen número de partículas, esto es,  $\langle \phi | \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle$  para todos los posibles valores de  $Z, N$  [116]. Teniendo en cuenta que debe cumplirse

$$\sum_{Z,N} \langle \phi | \hat{P}^Z \hat{P}^N | \phi \rangle = 1 \quad (4.1)$$

debido a la normalización de los estados intrínsecos, entonces podemos obtener la distribución en autovalores que se muestra en la Fig. 4.3. Así, se observa que en todos los casos –tanto HFB como PNVAP para todos los tipos de semillas– los máximos de la distribución se dan para el núcleo objetivo, esto es, el  $^{24}\text{Ne}$ , cuyo número de partículas en el espacio de valencia es  $Z_0 = 2$  y  $N_0 = 6$ . Por el contrario, el resto de la distribución depende del funcional que se esté minimizando.

Para este núcleo, se observa que los resultados HFB –paneles (a)-(c) de la Fig. 4.3– son independientes del tipo de semilla utilizada. Además, debido a la ausencia de las correlaciones de apareamiento  $pp$ , solo aparecen autoestados con  $Z = 2$ . En cuanto a la distribución en el número de neutrones, sin embargo, se observan autoestados con  $6 \pm 2$  y  $6 \pm 4$  partículas, si bien la distribución en dichos puntos presenta unos picos significativamente menores. Este último hecho no es más que una manifestación de la existencia de una cierta cantidad de apareamiento  $nn$  que contiene la función de onda intrínseca, rompiéndose así la simetría del número de neutrones. Otro aspecto que es interesante destacar es que dichos autoestados, además, corresponden a los isótopos par-par vecinos al núcleo objetivo, por lo que vemos que en todos los puntos

de la distribución tenemos la misma paridad del número de partículas.

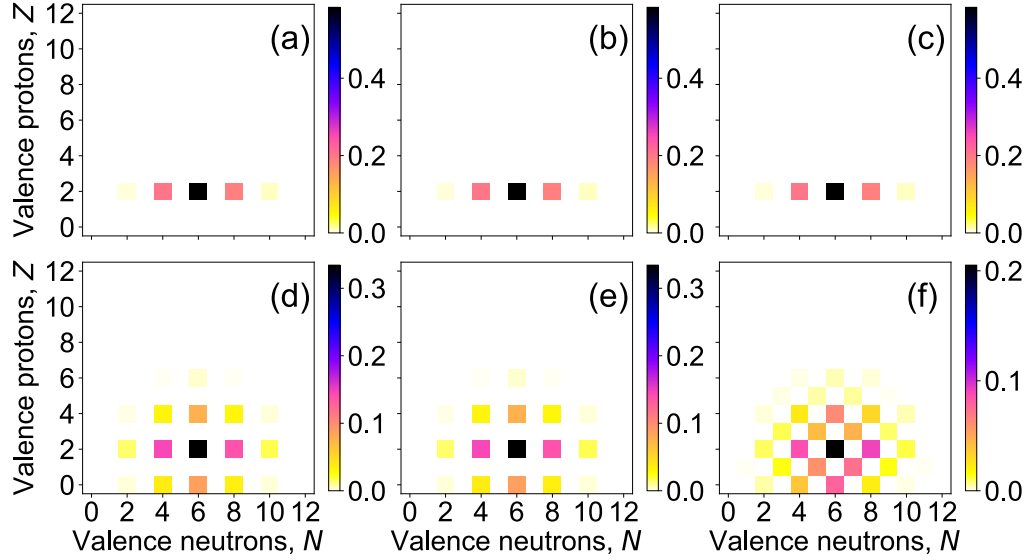


Figura 4.3: Distribución en autoestados de los operadores de número de protones y neutrones de las funciones de onda intrínsecas obtenidas con HFB/PNVAP con diferentes semillas: (a) HFB axial  $pn$ -no; (b) HFB general  $pn$ -no; (c) HFB general  $pn$ -yes; (d) PNVAP axial  $pn$ -no; (e) PNVAP general  $pn$ -no y (f) PNVAP general  $pn$ -yes. El núcleo considerado es el  $^{24}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 6$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

En relación a los resultados PNVAP sin mezcla  $pn$  –paneles (d)-(e) de la Fig. 4.3–, se puede observar una distribución más amplia en componentes, que se atribuye al hecho de tener presente correlaciones de apareamiento tanto  $nn$  como  $pp$ . Además, dado que el mínimo absoluto es axialmente simétrico, las distribuciones obtenidas con las semillas que no mezclan protones y neutrones son las mismas.

Vemos que en los casos en los que no hay mezcla  $pn$ , la distribución sigue presentando los núcleos vecinos con la misma paridad de número, ahora con diferente  $N$  y  $Z$ . Además, se sigue observando que el máximo se da en el sistema objetivo, decreciendo de modo similar a una distribución binomial, hecho que se puede justificar teóricamente[117].

Sin embargo, la diferencia más interesante surge cuando se permite la mezcla. En efecto, la presencia de correlaciones de apareamiento  $pn$  en las soluciones PN-

VAP produce una distribución donde podemos encontrar tanto vecinos par-par como impar-impar, ya que la paridad del número global es la misma en ambos casos. Si bien las contribuciones de estos últimos son ligeramente inferiores, sus pesos no son despreciables.

Este hecho, por tanto, nos permite la posibilidad de estudiar los núcleos impar-impar sin la necesidad de bloquear explícitamente dos estados de cuasipartículas.

#### 4.1.2. Caso par-impar: $^{25}\text{Ne}$

En el caso de querer describir sistemas de masa impar, esto es, núcleos par-impar o impar-par necesitamos funciones de onda intrínsecas que presenten una paridad del número de partículas impar[16]. Por tanto, este caso introduce un factor añadido a la elección del funcional a minimizar y el tipo de semilla, esto es, el estado inicial a bloquear.

En primer lugar, discutimos la influencia de bloquear diferentes estados en las energías HFB/PNVAP para diferentes semillas. Así, los estados iniciales del cálculo serán

$$|\phi_{0,a}\rangle = \hat{\beta}_{0,a}^\dagger |\phi_0\rangle \quad (4.2)$$

donde  $|\phi_0\rangle$  son semillas par-par del mismo tipo que las utilizadas para describir el  $^{24}\text{Ne}$  y  $\hat{\beta}_{0,a}^\dagger$  es el operador de creación de cuasipartículas en el espacio de valencia. Así, para el  $^{25}\text{Ne}$  en el espacio de valencia de la capa *sd* tendremos 12 posibles estados de neutrones a bloquear. Además, cuando se comienza con una semilla axialmente simétrica, la función de onda par-impar puede ser caracterizada por su componente de momento angular sobre el eje *z*, esto es,  $\hat{J}_z |\phi_a\rangle = K_a |\phi_a\rangle$ , tomando  $K_a$  los valores mostrados en el Cuadro 4.1.

Al igual que en el caso par-par, se han realizado 650 cálculos HFB/PNVAP con diferentes semillas para las 12 posibilidades de bloqueo. Los resultados no presentan diferencia alguna con los de las Fig. 4.1 y 4.2, por lo que no se muestran ni se analizan con mayor detalle. No obstante, tomando únicamente el mínimo absoluto en cada caso, en la Fig. 4.4 se han representado las energías en función del estado inicial bloqueado.

Aquí cabe destacar que, para un mismo tipo de semilla, la energía PNVAP se

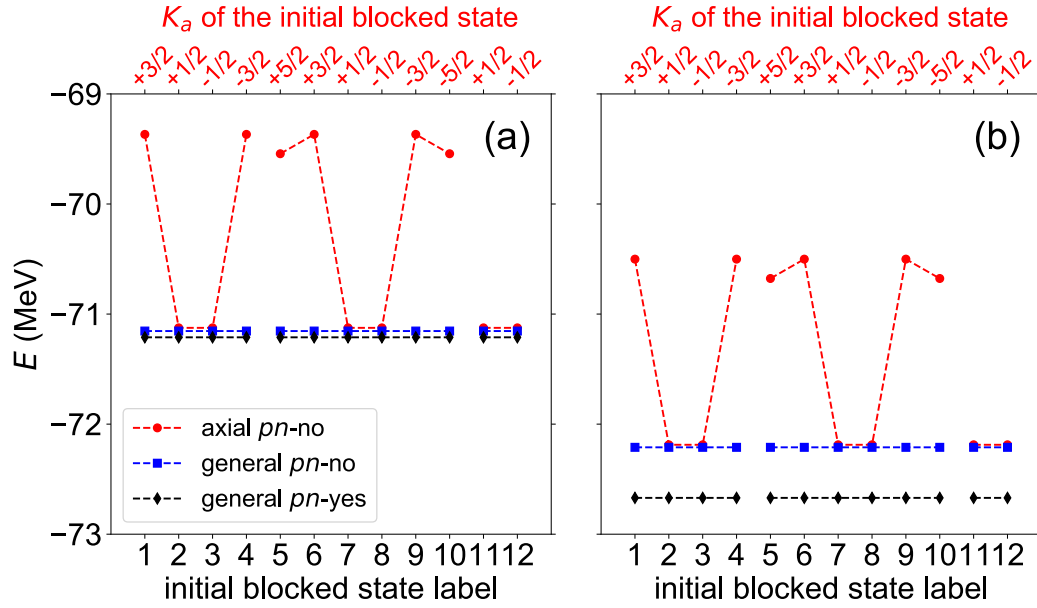


Figura 4.4: Energías (a) HFB y (b) PNVAP calculadas con las semillas axial  $pn$ -no (puntos rojos), general  $pn$ -no (cuadrados azules) y general  $pn$ -yes (diamantes negros) en función de la etiqueta del nivel de neutrones inicial bloqueado en la capa  $sd$  (de izquierda a derecha: órbitas  $0d_{3/2}$ ,  $0d_{5/2}$  y  $1s_{1/2}$ ). El núcleo considerado es el  $^{25}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 7$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

encuentra por debajo de la obtenida con HFB. También se observa que la solución basada en semillas generales con mezcla  $pn$  está por debajo de las que preservan la estructura de bloques separados. Esto se atribuye a las correlaciones de apareamiento  $pn$  adicionales que se incluyen en la función de onda gracias a la mezcla  $pn$  en la transformación de Bogoliubov.

Este último tipo de semillas produce soluciones que se encuentran por debajo de las que se obtienen con las axialmente simétricas. Además, las soluciones con semillas generales sin mezcla  $pn$  están por debajo de las soluciones con semillas axiales. En este último caso, podemos observar una fuerte dependencia de la energía con el nivel inicial bloqueado. En estos casos, tanto el estado inicial como el final (después de la minimización) satisfacen buen número  $K_a$  y, además, encontramos que la energía resultante es la misma para el mismo valor  $|K_a|$  del estado bloqueado. Así, para este núcleo en concreto, la energía más baja –dentro de la aproximación axial– se

n° de estado	$n_a$	$l_a$	$j_a$	$m_{j_a}$	$m_{t_a}$	$K_a$
1 (13)	0	2	3/2	3/2	-1/2 (1/2)	+3/2
2 (14)				1/2		+1/2
3 (15)				-1/2		-1/2
4 (16)				-3/2		-3/2
5 (17)			5/2	5/2		+5/2
6 (18)				3/2		+3/2
7 (19)				1/2		+1/2
8 (20)				-1/2		-1/2
9 (21)				-3/2		-3/2
10 (22)				-5/2		+5/2
11 (23)	1	0	1/2	1/2		+1/2
12 (24)				-1/2		-1/2

Cuadro 4.1: Estados del oscilador que componen la capa  $sd$  con sus respectivos números cuánticos y etiqueta de bloqueo en núcleos par-impar con simetría axial.

encuentra para  $|K_a| = 1/2$ , el cual es precisamente el valor del momento angular total del estado fundamental del  $^{25}\text{Ne}$  en una descripción sencilla de modelo de capas. Esta dependencia, como se puede comprobar en cualquiera de los paneles de la Fig. 4.4, desaparece cuando no se preserva la simetría axial. Por tanto, usar semillas generales –independientemente de que se permita o no la mezcla  $pn$ – simplifica en gran medida la descripción de los sistemas impares ya que (en la mayoría de los casos) no nos tendremos que preocupar por la elección inicial del estado a bloquear.

Analizamos ahora la descomposición en autoestados de  $\hat{Z}$  y  $\hat{N}$  para las soluciones de mínima energía de los cálculos anteriores. En la Fig. 4.5 se muestran los resultados obtenidos para las diferentes semillas.

En general, vemos que solamente contribuyen a la distribución en la función de onda intrínseca los autoestados con  $Z+N$  impar. Esto, como ya se ha mencionado, se debe a que solo se permiten estados con la misma paridad del número de partículas, que en este caso debe ser impar.

Además, como era de esperar, la mayor contribución corresponde a la del núcleo objetivo, esto es, en nuestro espacio de valencia, el autoestado con  $Z_0 = 2$  y  $N_0 = 7$ . En cuanto a las soluciones HFB, vemos que las semillas que no permiten la mezcla  $pn$  producen una distribución en la que solo encontramos autoestados con  $N = 7$ .

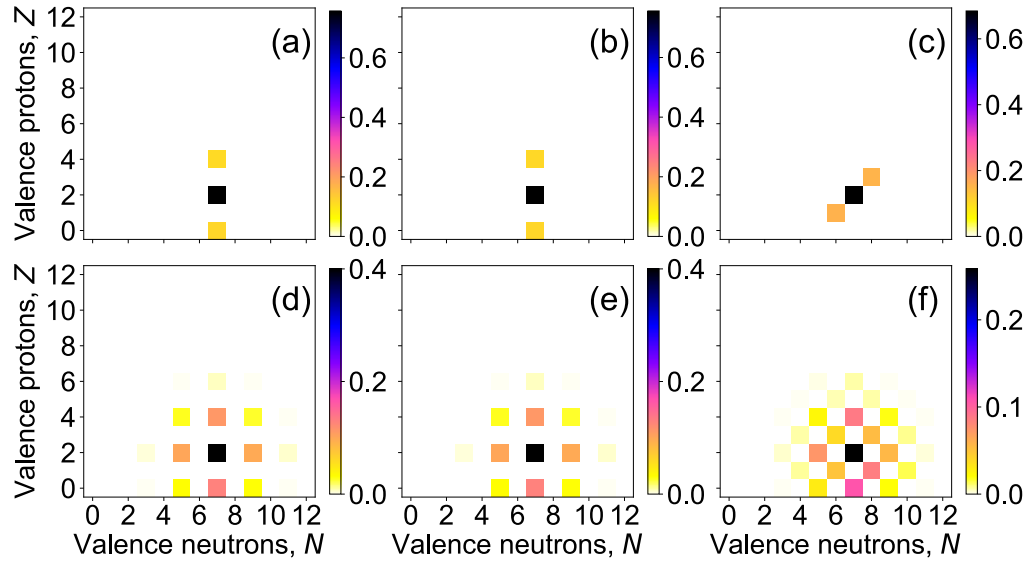


Figura 4.5: Igual que la Fig. 4.3 pero para el núcleo  $^{25}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 7$  en el espacio de valencia).

Esto se debe a que el bloqueo de un estado de neutrones hace que las correlaciones de apareamiento de neutrones sean prácticamente nulas a nivel de campo medio. También se pueden ver componentes de menor pesos en núcleos con  $Z = Z_0 \pm 2$ .

Sin embargo, si se permite la mezcla  $pn$ , las soluciones HFB adquieren una cierta cantidad de correlaciones de apareamiento isoescalares, mientras que en los canales isovectoriales – en cualquiera de los casos  $M_{T_p} = 0, \pm 1$ – no hay correlaciones de este tipo. Esto hecho se traduce en la aparición de dos pequeñas contribuciones en los núcleos con número de partículas impar con  $Z = Z_0 \pm 1$  y  $N = N_0 \pm 1$ .

De modo similar al  $^{24}\text{Ne}$ , cuando utilizamos el método PNVAP encontramos distribuciones más ricas, pues podemos explorar mejor las correlaciones de apareamiento. Así, empleando semillas sin mezcla  $pn$ , las funciones de onda se distribuyen en núcleos con  $Z = Z_0 \pm 2m$  y  $Z = Z_0 \pm 2n$ , siendo  $m$  y  $n$  números enteros. Además, la inclusión de la mezcla  $pn$  en la función de onda nos lleva a soluciones en las que se dan correlaciones de apareamiento  $pp$ ,  $nn$  y  $pn$  (tanto isoescalar como isovectorial) al mismo tiempo. Esto puede verse en el panel (f) de la Fig. 4.5, donde la descomposición ahora presenta una gran variedad de núcleos –tanto par-impar como



impar-par– alrededor del núcleo de  $^{25}\text{Ne}$ , cuyos pesos decrecen según nos alejamos de las componentes  $Z_0$  y  $N_0$ .

### 4.1.3. Caso impar-impar: $^{24}\text{Na}$

Por último, nos centramos en los sistemas que tienen un número impar tanto de protones como de neutrones. Al igual que en los dos ejemplos anteriores, realizamos los cálculos HFB/PNVAP con diferentes semillas y todas las posibles estructuras de bloqueo. Esto último se puede hacer gracias a la reducida dimensión del espacio de valencia. En efecto, tenemos 12 estados de protones y 12 de neutrones, por lo que tenemos 144 posibilidades.

De este modo, el primer paso necesario es bloquear uno de los estados de cuasi-partícula de protones y otro de neutrones para obtener formalmente una función de onda intrínseca de dos cuasipartículas, esto es,

$$|\phi_{0,a_p b_n}\rangle = \hat{\beta}_{0,a_p}^\dagger \hat{\beta}_{0,b_n}^\dagger |\phi_0\rangle \quad (4.3)$$

por lo que presenta una paridad del número global par. Sin embargo, si la parte de protones y neutrones se mantienen separadas, el estado presentaría un número paridad impar en ambos bloques por separado. Más aún, generalizando los resultados del caso impar, si la función de onda semilla es axialmente simétrica, uno podrá etiquetar la estructura de bloqueo con el valor  $K_{ab} = K_{a_p} + K_{b_n}$ . Por supuesto, para un mismo valor  $K_{ab}$  existen diversos modos de realizar el bloqueo. Por ejemplo, para  $K = 3$  algunas posibilidades serían  $1/2_p + 5/2_n$ ,  $5/2_p + 1/2_n$  o bien  $3/2_p + 3/2_n$ <sup>1</sup>. Como en los casos previos, se ha ejecutado una serie de cálculos (300 veces) para cada combinación de funcional (HFB/PNVAP), semilla y ahora bloqueo de estados, para determinar con mayor rigor el mínimo absoluto. De nuevo, los resultados no añaden ninguna novedad a los mostrados en las Fig. 4.1 y 4.2, por lo que se omite el análisis.

En la Fig. 4.6 se muestran las energías del mínimo absoluto encontrado HFB y

<sup>1</sup>Esta multiplicidad se extiende también a los propios valores de  $K$  de protones o neutrones. En efecto, del mismo modo que en el caso anterior, podemos encontrar la misma etiqueta en diferentes capas. Por ejemplo, para  $K_{a_p} = 1/2$  podemos bloquear el estado correspondiente a la capa  $0d_{5/2}$ ,  $0d_{3/2}$  y  $1s_{1/2}$ . Sin embargo, mientras que en el caso par-impar el funcional a minimizar converge en los mismos mínimos, se deberá ir con cautela a la hora de tratar con los sistemas impar-impar.

PNVAP en función de las combinaciones de bloqueo para cada tipo de semilla. En aras de la simplicidad, en la etiqueta del eje  $x$  se han englobado las 144 posibilidades como si se preservara la simetría axial en todos los casos. Esto implica que la etiqueta  $i$  correspondería al mismo  $(a_p; b_n)$  de las columnas bloqueadas en las matrices  $(U, V)$  que produciría, en el caso axial, el estado con  $K_{ab}$ .

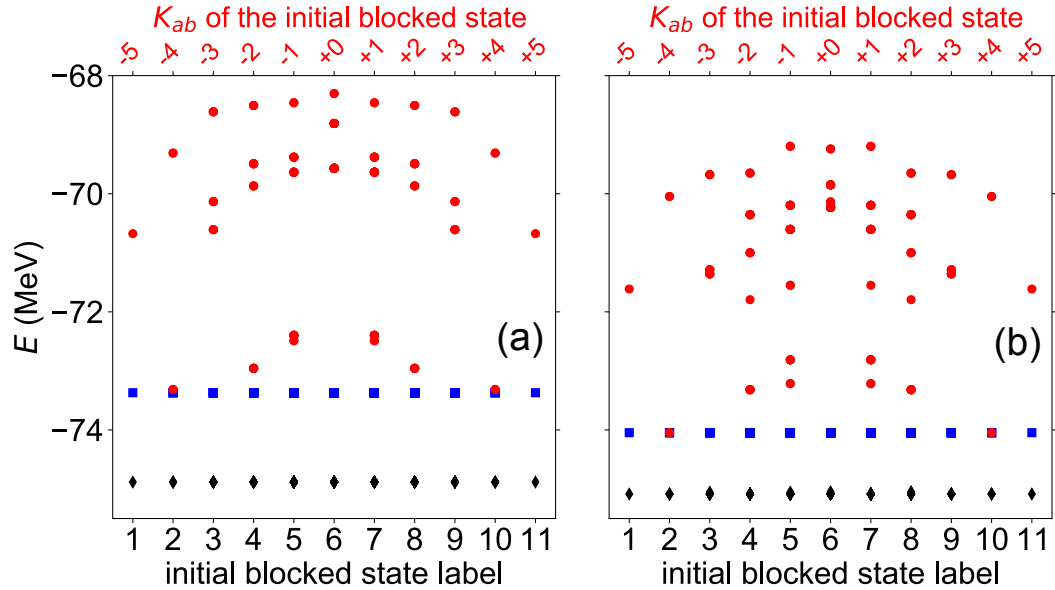


Figura 4.6: Energías (a) HFB y (b) PNVAP calculadas con las semillas axial  $pn$ -no (puntos rojos), general  $pn$ -no (cuadrados azules) y general  $pn$ -yes (diamantes negros) en función de la etiqueta del bloqueo (de protones y neutrones) en la capa  $sd$ . El núcleo considerado es el  $^{24}\text{Na}$  ( $Z = 3$  y  $N = 5$  en el espacio de valencia) con la interacción USD.

Las observaciones generales discutidas en el  $^{24}\text{Ne}$  y  $^{25}\text{Ne}$  también se mantienen en este caso, esto es, las energías PNVAP presentan valores inferiores a las HFB y las semillas generales con mezcla  $pn$  producen las energías más bajas mientras que las axialmente simétricas las más altas. Además, en el caso de semillas generales, los resultados son independientes de la estructura de niveles bloqueados, mientras que en las semillas axialmente simétricas aparece de nuevo una fuerte dependencia en el  $K_{ab}$  resultante. En este último caso también se observa que la energía es la misma para el par de valores  $\pm K_{ab}$ .

Por último, también es interesante notar que la menor energía encontrada con

las semillas axiales corresponde a  $|K| = 4$ , que es precisamente el valor del momento angular total –tanto exacto como experimental– del estado fundamental del núcleo de  $^{24}\text{Na}$ .

Para completar este análisis, se presentan en la Fig. 4.7 las diferentes distribuciones en autoestados de  $\hat{N}$  y  $\hat{Z}$  para los diferentes mínimos globales encontrados en función del funcional y el tipo de semilla. Aquí, las principales diferencias con respecto a los análisis previos se encuentran en el caso de minimizar el funcional HFB.

En primer lugar, las semillas sin mezcla  $pn$  no son capaces de romper espontáneamente el número de partículas, por lo que se obtienen soluciones sin ninguna correlación de apareamiento. Esto, por tanto, se traduce en un único pico en la distribución en el núcleo objetivo, esto es, con  $Z_0 = 3$  y  $N_0 = 7$ . Más interesante aún, las soluciones HFB obtenidas en el caso de permitir la mezcla son en realidad falsos vacíos impar-impar. Esto puede observarse en el panel (c), donde no se encuentran autoestados con número impar de protones y neutrones, mientras que las mayores contribuciones se dan en los núcleos par-par con  $Z = Z_0 \pm 1$  y  $N = N_0 \pm 1$ .

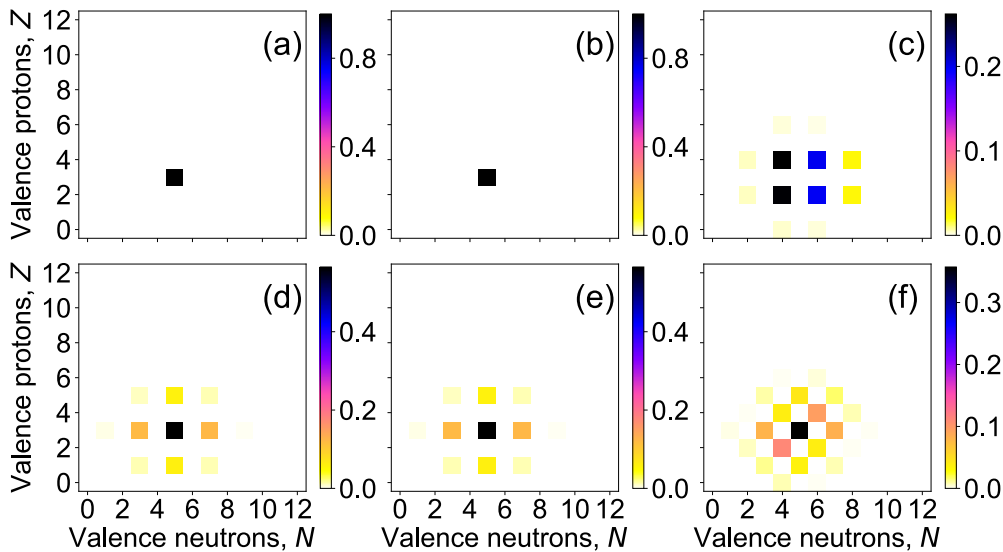


Figura 4.7: Igual que la Fig. 4.3 pero para el núcleo  $^{24}\text{Na}$  ( $Z = 3$  y  $N = 5$  en el espacio de valencia).

Esto se debe a que la transformación de Bogoliubov solo preserva la paridad del

número de nucleones, esto es,  $(-1)^{Z+N}$ . Por tanto, la minimización HFB produce funciones de onda con una paridad global par y con estados apareados (sin estados monoparticulares totalmente ocupados y sus conjugados vacíos). En este sentido, el método HFB con la semilla que presenta la mezcla  $pn$  es inútil para describir sistemas impar-impar. Así, un posible modo de evitar este problema sería imponer ligaduras en el contenido de apareamiento de los estados intrínsecos durante el proceso de minimización.

Afortunadamente, el método PNVAP sí es capaz de obtener estados que describen este tipo de núcleos, con y sin mezcla  $pn$ . Como puede verse en los paneles (d) y (e) de la Fig. 4.7, las semillas que no consideran dicha mezcla caen en estados con una paridad impar en protones y neutrones de forma separada. Así, en los estados intrínsecos obtenidos encontramos correlaciones de apareamiento  $pp$  y  $nn$  y, junto con el pico de la distribución en  $(Z_0, N_0)$  encontramos algunas componentes en  $(Z_0 \pm 2, N_0 \pm 2)$ . Por último, con la semilla general con mezcla  $pn$  encontramos correlaciones en los canales isovectorial e isoescalar. De modo similar al caso par-impar, este último hecho se refleja en el panel (f), donde surgen autoestados tanto par-par como impar-impar en la función de onda intrínseca alrededor del máximo en el núcleo objetivo.

#### 4.1.4. Cálculos sistemáticos de las energías de estados fundamentales

Extendemos ahora los cálculos sin ligaduras llevado a cabo en los núcleos  $^{24}\text{Ne}$ ,  $^{25}\text{Ne}$  y  $^{24}\text{Na}$  a todos los posibles núcleos par-par, par-impar (o impar-par, dado que la interacción es invariante bajo isoespín, por lo que los núcleos espejo presentan los mismos resultados) e impar-impar en la capa  $sd$ .

Salvo que se diga lo contrario, las energías mostradas serán siempre referidas a la exacta, obtenida a partir de la diagonalización completa del problema. Dicho de otro modo, se discutirán las diferencias en la energía, dadas por

$$\Delta E = E_{approx} - E_{exact} \quad (4.4)$$

Así, se muestran estas diferencias para los diferentes isótopos en la capa  $sd$  tanto en la Fig. 4.8 (núcleos par-par y par-impar) como en 4.9 (núcleos impar-impar),

donde se han empleado funciones de onda generales con y sin mezcla  $pn$  con los métodos HFB y PNVAP. En el caso de los núcleos impar-impar no se ha incluido el cálculo HFB con mezcla  $pn$  por el motivo mencionado en el apartado anterior, esto es, los estados intrínsecos obtenidos son falsos vacíos impar-impar que solamente presentan autoestados de  $\hat{Z}$  y  $\hat{N}$  con número de partículas par en ambas especies de nucleones.

A grandes rasgos, en ambos cálculos observamos que esta diferencia presenta siempre valores positivos, esto es, la energía variacional se encuentra siempre por encima de la exacta. Este hecho era de esperar dado que estas aproximaciones no incluyen todas las correlaciones contenidas en los autoestados exactos del hamiltoniano nuclear. De hecho, se observa que el funcional PNVAP siempre produce resultados más cercanos al exacto que el HFB en el caso de comparar el mismo tipo de semillas.

Además, las mayores diferencias con respecto de la diagonalización completa las encontramos en los núcleos de mitad de capa. Esto es, cuando el número de protones o neutrones produce un llenado intermedio en los orbitales del espacio de valencia escogido, en nuestro caso  $Z(N) \approx 6$ . En dichos casos, los efectos de restaurar más simetrías o realizar la mezcla de configuraciones (cálculo PGCM completo) tomará especial relevancia en comparación con los núcleos que se encuentran en los extremos de la capa.

Es interesante destacar también el comportamiento general de dientes de sierra (*staggering*) que encontramos en todas las cadenas (salvo en el caso de los oxígenos) compuestas de isótopos par-par y par-impar, donde los casos con  $N$  impar presentan energías variacionales más cercanas a la exacta que sus núcleos vecinos par-par (ver Fig. 4.8).

Comparando ahora las soluciones con y sin mezcla  $pn$  en el espacio variacional, vemos un comportamiento diferente entre las aproximaciones HFB y PNVAP. En primer lugar, para el caso HFB, las diferencias entre ambas soluciones son muy pequeñas en los isótopos par-impar. Si se analizan de cerca las energías de apareamiento, podemos encontrar que las soluciones con semillas generales  $pn$ -no tienen  $E_{pair}^{nn} = 0$  (salvo para los núcleos  $^{19,21}\text{O}$ ) y  $E_{pair}^{pp} = 0$  (salvo para los casos  $^{25,27}\text{Ne}$ ,  $^{21,31}\text{Mg}$ ,  $^{23,25}\text{Si}$ ,  $^{25}\text{S}$  y  $^{27,29,31}\text{Ar}$ ). Por el contrario, todas las soluciones  $pn$ -yes presentan  $E_{pair}^{pn} \neq 0$  (salvo para la cadena del O y los isótopos  $^{23}\text{Ne}$ ,  $^{29}\text{Mg}$ ,  $^{27-31}\text{Si}$ ), y

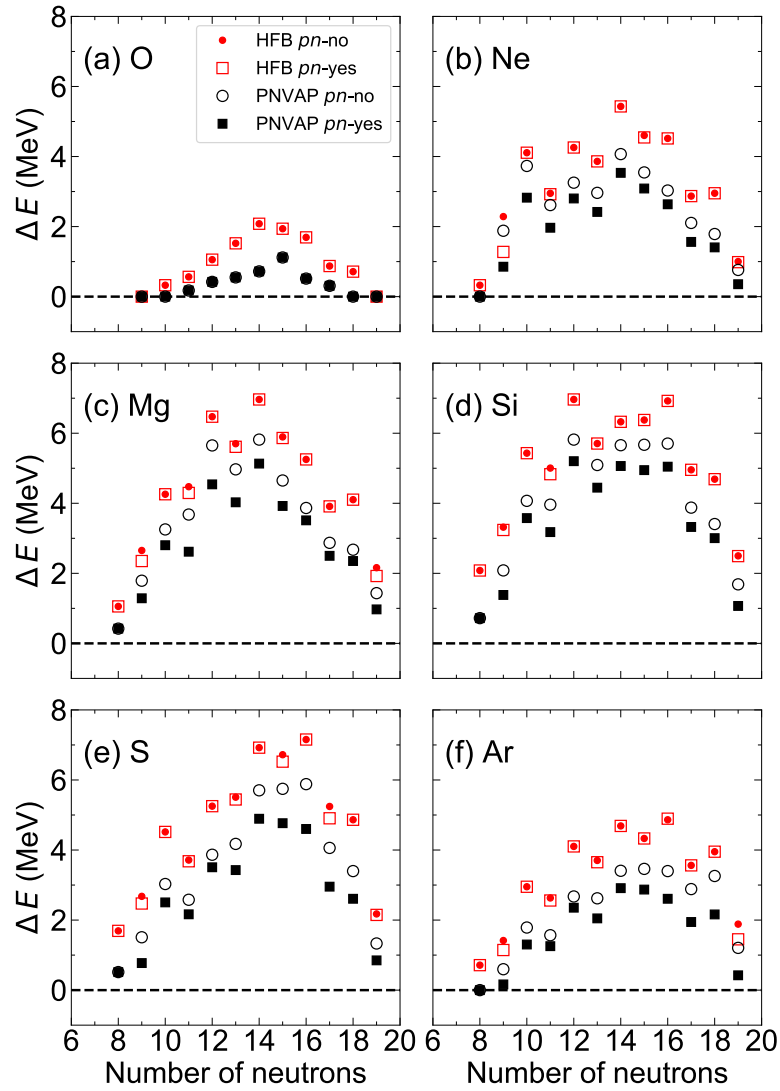


Figura 4.8: Diferencia de energía con respecto de la solución exacta para los cálculos sin ligaduras HFB (color rojo) y PNVAP (color negro) para los núcleos par-par y par-impar de la capa  $sd$  y la interacción USD. Se han usado las semillas general  $pn$ -no (cajas y puntos) y  $pn$ -yes (círculos y cuadrados rellenos).

$E_{pair}^{pp/nn} = 0$ , mostrando que las fases de apareamiento  $pp/nn$  y  $pn$  no se mezclan en las soluciones de campo medio cuando no se imponen ligaduras[118]. Esta situación es más extrema aún en el caso de los isótopos par-par donde las soluciones para las semillas generales  $pn$ -no y  $pn$ -yes son las mismas, dado que tenemos  $E_{pair}^{pn} = 0$  en

todos los casos. De hecho, en los casos  $N = Z$  las soluciones colapsan en estados de tipo HF en los que no hay apareamiento de ningún tipo.

En segundo lugar, analizando los resultados PNVAP podemos extraer diferentes conclusiones. Aquí, se observa una diferencia clara según se permita o no la mezcla entre estados de protones y neutrones. En concreto, la semilla general *pn-yes* siempre produce las energías con la menor valor, salvo en los casos en los que no haya protones o neutrones en el espacio de valencia. Además, debe destacarse que los estados intrínsecos obtenidos con PNVAP, dado que se minimiza la energía proyectada buen número de partículas, presentan siempre correlaciones de apareamiento. Más interesante aún, la función de onda intrínseca *pn-yes* contiene al mismo tiempo apareamiento *pp*, *nn* y *pn*, independientemente del tipo de núcleo (par-par, par-impar o impar-impar). Este resultado, por tanto, muestra la superioridad de la aproximación PNVAP para incluir correlaciones más complejas, por lo que los estados intrínsecos obtenidos podrán usarse –como se verá a continuación– para construir mejores aproximaciones a los autoestados del hamiltoniano nuclear.

A la luz de todo lo anterior, podemos ver que las aproximaciones HFB y PNVAP son capaces de describir en gran medida las energías del estado fundamental del conjunto de núcleos estudiados, siendo el método PNVAP el que mejores resultados reporta, permitiendo incluso describir sistemas impar-impar dentro del mismo formalismo, independientemente de permitir o no la mezcla *pn*.

## 4.2. Cálculos con ligaduras

En la sección anterior se ha analizado la capacidad de los métodos HFB y PNVAP de obtener funciones de onda que se aproximen a los verdaderos autoestados del hamiltoniano de muchos cuerpos nuclear en función de las simetrías impuestas en la semilla del cálculo y del tipo de núcleo. Sin embargo, las energías de estado fundamental obtenidas muestran que todavía existen correlaciones que no se están teniendo en cuenta y, en los casos más complejos (núcleos a mitad de capa) no son en absoluto despreciables.

De este modo, a lo largo de esta sección se mostrará que la mayoría de estas correlaciones podrán ser incluidas restaurando la simetría de la invariancia rotacional y

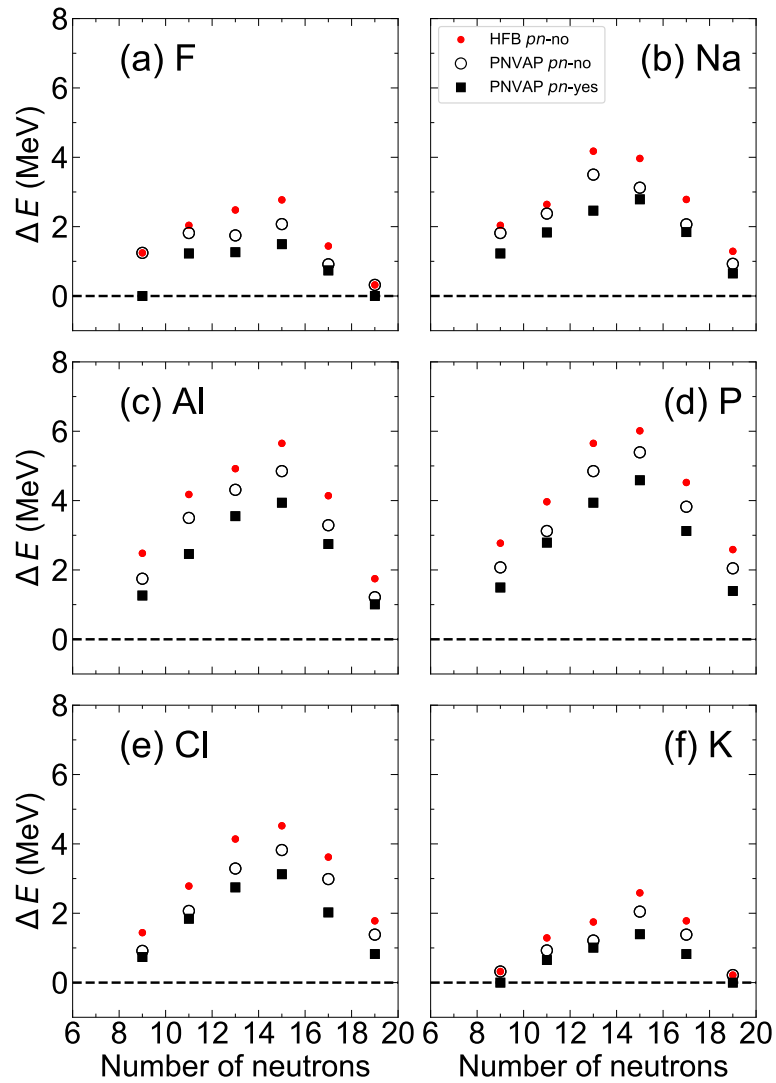


Figura 4.9: Igual que la Fig. 4.8 pero para los isótopos impar-impar. Para el caso HFB solo se han usado semillas generales  $pn$ -no.

considerando la mezcla de diferentes estados de cuasipartícula, gracias al formalismo PGCM. Gracias a esta herramienta, además, se podrán obtener aproximaciones al espectro de energías excitadas y a diversas propiedades electromagnéticas.



### 4.2.1. Estudio preliminar del $^{24}\text{Ne}$

Unos de los aspectos críticos del método PGCM es la selección de las coordenadas generadoras. Así, teniendo en cuenta la naturaleza de la interacción nuclear, las opciones más habituales son las deformaciones cuadrupolares y el apareamiento [119]. Como ejemplo, analizamos la energía HFB/PNVAP en función de los parámetros de deformación cuadrupolares  $(\beta_2, \gamma)$  y la energía PNVAP en función de las deformaciones axiales y los parámetros de apareamiento  $(\beta_2, \delta_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p})$  para el núcleo de  $^{24}\text{Ne}$ . Estas superficies de energía total (TES) se han obtenido mediante la resolución de las ecuaciones HFB y PNVAP imponiendo ligaduras en los parámetros anteriores.

Así, de la Fig. 4.10 extraemos que los mínimos de energía se dan para deformaciones axiales proladas, tanto en el caso HFB como PNVAP y que las superficies son más suaves a lo largo del grado de libertad  $\gamma$  que en la dirección de  $\beta_2$ .

También encontramos que incrementar las correlaciones de apareamiento –debido a pasar del caso HFB a PNVAP e incluir correlaciones  $pn$ – se traduce en una cierta tendencia a disminuir la deformación. Además, consistentemente con la sección anterior, vemos que el cálculo PNVAP con mezcla  $pn$  produce la superficie con menor energía.

En cuanto a la dependencia de la energía con la deformación y el apareamiento, se ha representado en la Fig. 4.11 la TES con el método PNVAP explorando explícitamente los grados de libertad de apareamiento isoescalar ( $J_p = 1, T_p = 0$ ) e isovectorial ( $J_p = 0, T_p = 1$ ). Cabe remarcar que aumentar el valor de  $\delta$  en un canal determinado se traduce en aumentar la energía de apareamiento correspondiente. Por ejemplo,  $\delta_{M_{J_p}=0 M_{T_p}=-1}^{J_p=0 T_p=1}$  mide la cantidad de apareamiento  $pp$  contenida en la función de onda intrínseca HFB o PNVAP.

En dichas superficies se han encontrado, en todos los casos, dos mínimos asociados a las deformaciones prolada y oblada, siendo la primera de estas la correspondiente al mínimo absoluto. Esto es consistente con la TES triaxial discutida previamente, donde el mínimo oblado corresponde al estado de menor energía para  $\gamma = 60^\circ$  que puede encontrarse en la Fig. 4.10.

Las superficies en función del contenido de apareamiento, tanto isovectorial como isoescalar, son razonablemente suaves en la dirección de  $\delta$  alrededor de ambos mínimos axiales. Además, los mínimos encontrados ahora se encuentran en regio-

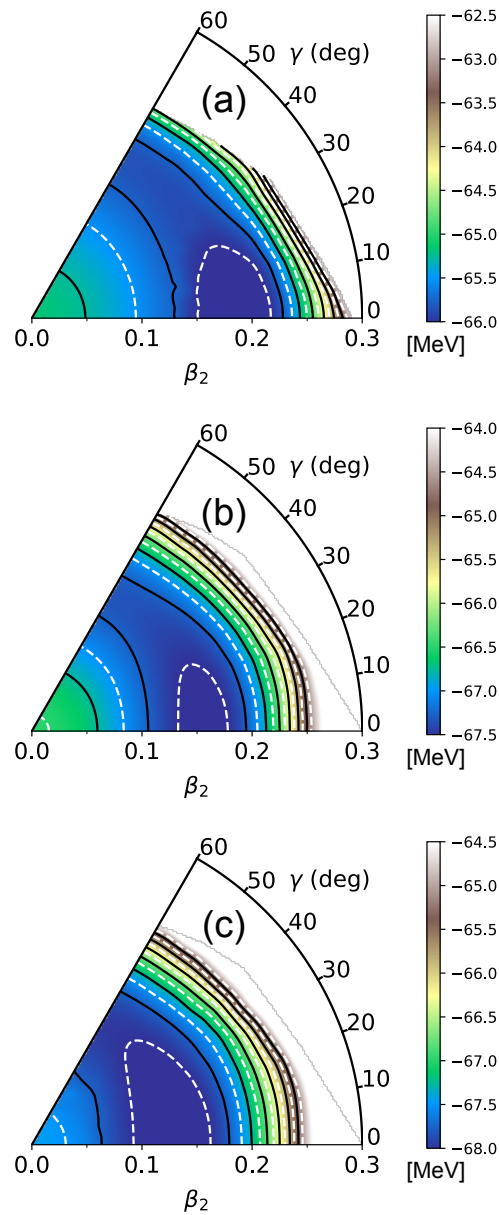


Figura 4.10: Superficies de energía total en función de las deformaciones triaxiales  $(\beta_2, \gamma)$  del  $^{24}\text{Ne}$  con las aproximaciones (a) HFB *pn-no*, (b) PNVAP *pn-no* y (c) PNVAP *pn-yes*. Las curvas de nivel están separadas en intervalos de 0.25 MeV y la escala de color es diferente en cada representación.

nes con  $\delta \neq 0$ , mostrando la capacidad del método PNVAP de incluir todo tipo de apareamientos en la función de onda intrínseca.

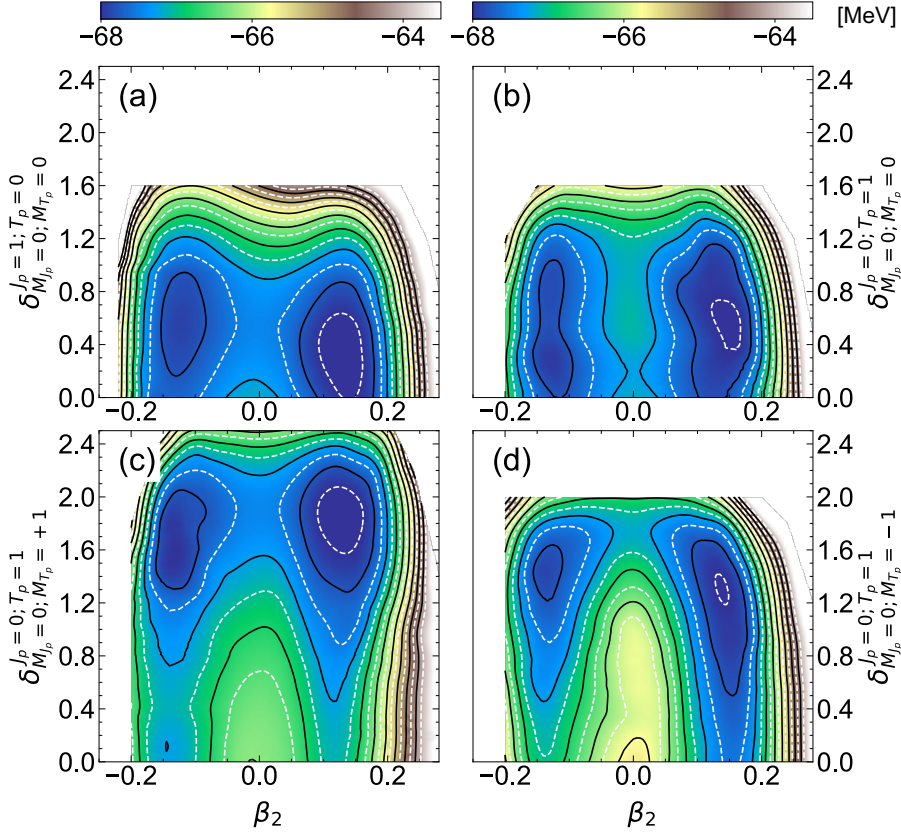


Figura 4.11: Superficies de energía total PNVAP para el  $^{24}\text{Ne}$  en función de la deformación cuadrupolar  $\beta_2$  y apareamiento (a) isoescalar,  $\delta_{M_{J_p}=0, T_p=0}^{J_p=1, T_p=0}$ , (b)  $pn$  isovectorial,  $\delta_{M_{J_p}=0, T_p=0}^{J_p=0, T_p=1}$ , (c)  $nn$   $\delta_{M_{J_p}=0, T_p=+1}^{J_p=0, T_p=1}$  y (d)  $pp$ ,  $\delta_{M_{J_p}=0, T_p=-1}^{J_p=0, T_p=1}$ . Las curvas de nivel están separadas en intervalos de 0.25 MeV y la escala de colores es la misma en todos los paneles.

La suavidad en los dos tipos de superficies mostradas sugiere, por tanto, que la mezcla de las distintas configuraciones puede tomar un papel importante a la hora de obtener la función de onda del  $^{24}\text{Ne}$ . De este modo, el siguiente paso es la evaluación del espectro de energías de nuestro núcleo prueba dentro del marco PGCM con los distintos tipos de funciones de onda utilizados hasta el momento. Los resultados se representan en la Fig. 4.12, donde se observa, a grandes rasgos, un buen acuerdo entre las distintas aproximaciones variacionales y el espectro de energías exacto.

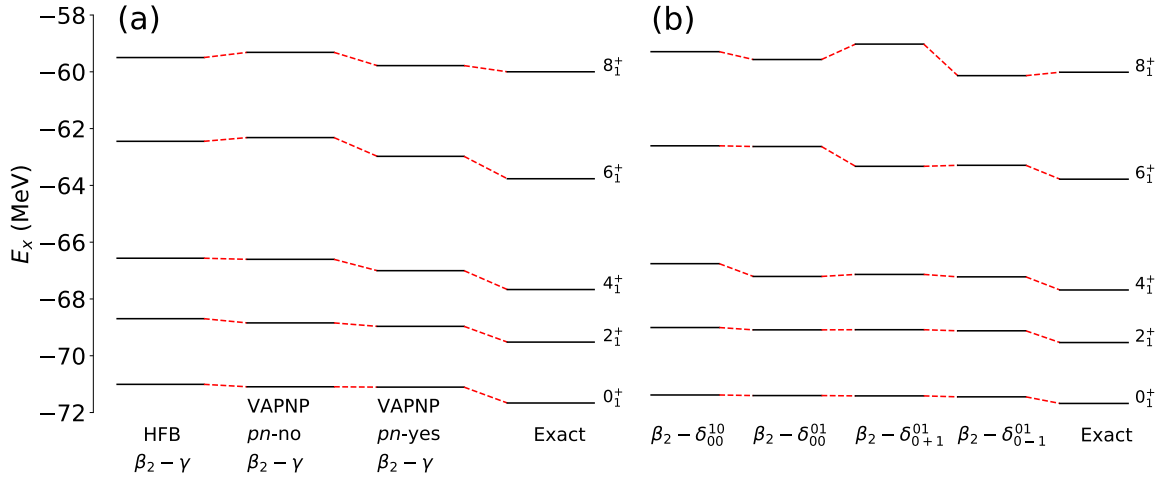


Figura 4.12: Energías PGCM y exacta de los estados yrast del  $^{24}\text{Ne}$  calculados con la interacción USD. (a) PGCM explorando el plano  $(\beta_2, \gamma)$  con HFB y PNVAP y (b) PGCM explorando  $(\beta_2, \delta_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p})$  con PNVAP.

Las energías del estado fundamental obtenidas con cualquiera de los cálculos PGCM están en torno al 1% por encima de la exacta, siendo las mejores aproximaciones las que exploran conjuntamente deformaciones y apareamiento explícitamente con funciones de onda obtenidas con la minimización PNVAP.

En el panel (a) de la Fig. 4.12 se puede ver que la inclusión de estados con mezcla  $pn$  comprime el espectro en comparación con las otras dos aproximaciones, donde se preserva la estructura de bloques separados en ambas especies de nucleones. En cualquier caso, apreciamos que la mezcla de configuraciones con estados HFB produce también buenos resultados a pesar de las notables diferencias que se observaban en los cálculos sin ligaduras.

En cuanto al cálculo PGCM que explora deformaciones y apareamientos, en el panel (b) se observan resultados similares para el conjunto de energías, especialmente si comparamos entre sí los resultados con apareamiento  $pn$  isoescalar ( $\delta_{00}^{10}$ ) e isovectorial ( $\delta_{00}^{01}$ ) o apareamiento  $pp$  ( $\delta_{0-1}^{01}$ ) y  $nn$  ( $\delta_{0+1}^{01}$ ).

Estas similitudes también las encontramos en la evaluación de las probabilidades de transición y momentos cuadrupolares eléctricos, resumidos en el Cuadro 4.2. Para dicho cálculo se han tomado las cargas efectivas de 1.5 y 0.5 para protones y

neutrones respectivamente. Así, vemos de nuevo un buen acuerdo en las diferentes aproximaciones con el valor exacto. Si bien se observa una cierta sobreestimación en la mayoría de resultados, todas las aproximaciones reproducen el elevado (bajo) valor de  $B(E2, 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$  [ $B(E2, 2_2^+ \rightarrow 0_1^+)$ ], así como el signo y el orden de magnitud de los momentos cuadrupolares espectroscópicos. Además, los momentos negativos se deben principalmente a configuraciones con deformación prolada, como las mostradas en las superficies de las Fig. 4.10 y 4.11.

Aprox.	$2_1^+ \rightarrow 0_1^+$	$2_2^+ \rightarrow 0_1^+$	$2_1^+$	$2_2^+$	$4_1^+$
$(\beta_2, \gamma)_{\text{HFB } pn\text{-no}}$	53.3	1.0	-5.4	+6.5	-17.2
$(\beta_2, \gamma)_{\text{VAPNP } pn\text{-no}}$	54.1	2.1	-3.8	+4.8	-16.8
$(\beta_2, \gamma)_{\text{VAPNP } pn\text{-yes}}$	54.9	2.3	-4.2	+5.1	-16.6
$(\beta_2, \delta_{00}^{01})$	53.7	2.4	-3.7	+2.4	-15.3
$(\beta_2, \delta_{00}^{10})$	53.4	1.9	-4.1	+3.6	-14.5
$(\beta_2, \delta_{0-1}^{01})$	52.9	1.4	-3.8	+5.3	-15.4
$(\beta_2, \delta_{0+1}^{01})$	54.5	2.0	-5.1	+4.0	-15.5
Exacto	52.3	0.6	-3.6	+5.5	-15.4

Cuadro 4.2: Probabilidades de transición cuadrupolares eléctricas,  $B(E2)$ , en  $e^2\text{fm}^4$  y momentos,  $Q(J^\pi)$  en  $\text{efm}^2$  calculados con las diferentes aproximaciones PGCM y con la diagonalización exacta para el  $^{24}\text{Ne}$ .

### 4.2.2. Cálculos sistemáticos PGCM

Los resultados obtenidos para el  $^{24}\text{Ne}$  en el apartado anterior sugieren que cualquiera de las aproximaciones PGCM empleadas para la obtención de espectros, al menos en dicho núcleo, están en gran acuerdo con la diagonalización completa del sistema. Por supuesto, los grados de libertad incluidos en la mezcla de configuraciones están bastante limitados por el tamaño del espacio de valencia, por lo que cabe esperar peores resultados en capas de mayor tamaño o en cálculos *no-core*.

Aún considerando esto, analizamos ahora la calidad del método PGCM de forma más global. Se han calculado las energías y propiedades electromagnéticas de toda la capa *sd* con tres esquemas PGCM distintos, donde las funciones de onda intrínsecas se han obtenido con la minimización HFB o PNVAP, utilizando como coordenadas generadoras los parámetros de deformación habituales ( $\text{PGCM}_{(\beta_2, \gamma)}$ ).

Dado que estamos especialmente interesados en el papel que desempeña la mezcla  $pn$ , los tres métodos difieren en la inclusión de dicha mezcla en los estados intrínsecos. Así, las aproximaciones HFB-PGCM y PNVAP-PGCM  $pn-no$  preservarán la estructura de tipo producto de protones y neutrones, mientras que PNVAP-PGCM  $pn-yes$  permite la ruptura de dicha simetría.

En primer lugar, analizamos la energía de los estados fundamentales obtenidos resolviendo la ecuación de HWG para cada núcleo. En la Fig. 4.13 se muestran los núcleos par-par y par-impar, mientras que en la Fig. 4.14 los impar-impar.

Si comparamos estos resultados con los cálculos sin ligaduras (Fig. 4.8 y 4.9), observamos una ganancia en energías de correlación debido a la proyección a momento angular y la mezcla de configuraciones. Aunque no se muestra en las gráficas, el momento angular de los estados fundamentales exactos se reproducen perfectamente en los casos par-impar e impar-impar, a excepción del  $^{34}\text{Cl}$  en las aproximaciones PNVAP-PGCM. En este caso, en particular, el estado exacto  $0_1^+$  está casi degenerado con el estado excitado  $3_1^+$ , mientras que en las aproximaciones variacionales que exploran deformaciones es precisamente este último el de más baja energía, estando el  $0_1^+$  pobremente reproducido.

Por otro lado, las implementaciones HFB-PGCM no son capaces de reproducir correctamente dichos valores en los estados fundamentales de los isótopos impar-impar  $^{26}\text{F}$  ( $^{26}\text{Cl}$ ),  $^{28}\text{Na}$  ( $^{28}\text{K}$ ),  $^{32}\text{Al}$  ( $^{32}\text{K}$ ),  $^{34}\text{Cl}$  y  $^{34}\text{P}$  ( $^{34}\text{K}$ ). Así, los resultados mostrados en la Fig. 4.14 se han obtenido usando los estados con el mismo momento angular que los análogos exactos, a pesar de que no correspondan con el valor de mínima energía obtenida dentro del esquema variacional.

En cualquier caso, vemos que las aproximaciones PGCM con estados que minimizan con HFB son generalmente peores que los que han utilizado PNVAP para la obtención de los estados intrínsecos. Es más, la aproximación PNVAP-PGCM con semillas generales  $pn-yes$  siempre está más cerca del valor exacto que en el caso PNVAP-PGCM con semillas sin esta mezcla. En el primero de los casos, las desviaciones con respecto de la energía exacta del estado fundamental son, en general, menores a 1 MeV. Así, de modo similar a los cálculos sin ligaduras, estas discrepancias son mayores para los núcleos a mitad de capa y el grado de acuerdo es similar en todos los tipos de núcleos.

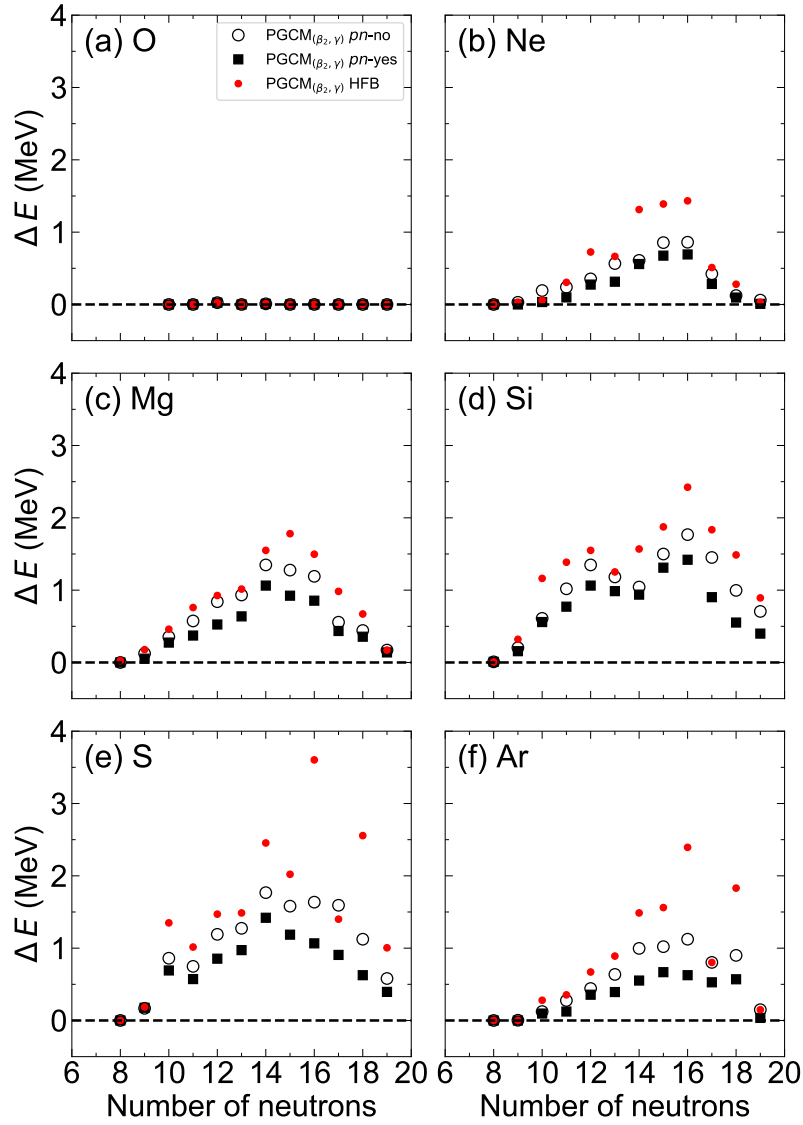


Figura 4.13: Diferencia en la energía del estado fundamental PGCM con respecto la exacta usando  $(\beta_2, \gamma)$  como coordenadas generadoras para los núcleos par-par y par-impar en la capa *sd* con la interacción USD. Se han utilizado tres tipos de estados HFB: general *pn-no* (círculos negros), general *pn-yes* (cuadrados rellenos negros) ambos con PNVAP y general *pn-yes* con HFB (puntos rojos).

Se puede percibir, además, que el comportamiento de *staggering* par-impar se atenúa significativamente, a excepción de la cadena isotópica del S en el caso HFB-PGCM. Las diferencias entre los diferentes esquemas PGCM son más pequeñas que

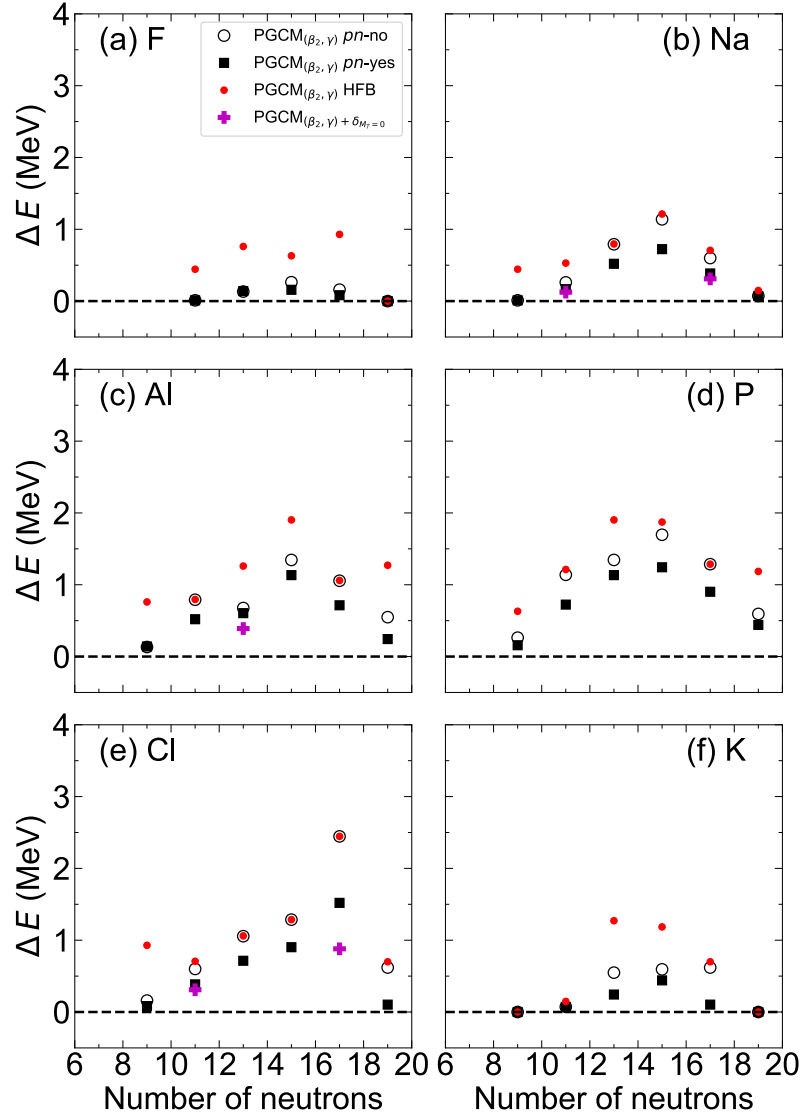


Figura 4.14: Igual que la Fig. 4.13 pero para los isótopos impar-impar. Los resultados HFB solo incluyen semillas generales *pn-no*. Las cruces magenta muestran los resultados PNVAP-PGCM incluyendo el apareamiento con  $M_{T_p} = 0$  junto con  $(\beta_2, \gamma)$ .

las que se encontraron en los cálculos previos, aunque en determinados núcleos dichas diferencias pueden ser notablemente altas, como es el caso de los isótopos  $^{32}\text{S}$  y  $^{34}\text{S}$ . Aún con esto, cuando comparamos los resultados HFB sin ligaduras con la aproxi-



mación HFB-PGCM, la ganancia de energía es de aproximadamente 3 y 2.5 MeV, respectivamente. Este hecho, no obstante, indica que la inclusión de las correlaciones PNVAP junto con la mezcla  $pn$  puede ayudar a reproducir mejor la energía de los estados fundamentales.

También es interesante notar que ambas aproximaciones PNVAP-PGCM producen resultados igualmente buenos en lo que se refiere a los estados fundamentales de los núcleos con  $N = Z$ . Sin embargo, el método HFB-PGCM describe en mejor medida los núcleos de  $^{20}\text{Ne}$  y  $^{24}\text{Mg}$ , obteniendo en el resto  $^{28}\text{Si}$ ,  $^{32}\text{S}$  y  $^{36}\text{Ar}$  diferencias mucho mayores. El origen de estas diferencias puede atribuirse a la presencia de la mezcla  $pn$  en el conjunto de estados intrínsecos HFB para los isótopos de  $^{20}\text{Ne}$  y  $^{24}\text{Mg}$ .

Un modo más cuantitativo de evaluar la bondad de los métodos PGCM para reproducir las energías de los estados fundamentales es calcular la raíz del error cuadrático medio (*Root-Mean-Square-Deviation*, RMSD) entre las aproximaciones y el valor exacto. Dicha cantidad se muestra en la tercera columna del Cuadro 4.3, de modo separado para el conjunto de núcleos par-par, par-impar e impar-impar con cada una de las aproximaciones HFB-PGCM y PNVAP-PGCM (con y sin mezcla  $pn$ ).

En particular, vemos que la mejor aproximación, como era de esperar, es el esquema PNVAP-PGCM con mezcla  $pn$ , la segunda mejor, el análogo  $pn$ -no y en último lugar, HFB-PGCM. Los mayores errores que se han encontrado en las diferentes aproximaciones han sido de 637, 945 y 1375 keV, respectivamente, lo que denota el buen acuerdo que hay con los resultados exactos, especialmente en el caso PNVAP-PGCM con semillas  $pn$ -yes. Además, las desviaciones en las energías de los estados fundamentales son similares en los tres tipos de núcleos para esta aproximación, mientras que la calidad de los resultados HFB-PGCM son peores en los núcleos par-par en comparación con los otros dos tipos, mostrando que las correlaciones de apareamiento no se tratan adecuadamente dentro de este esquema variacional.

Estudiamos ahora la capacidad del nuestro método para reproducir las energías de excitación. En las Fig. 4.15, 4.16, 4.17 se muestran los resultados para los núcleos par-par, par-impar e impar-impar, respectivamente.

En relación con los isótopos par-par, se observa una gran capacidad descriptiva

Núcleo	aprox. PGCM	g.s.	$0_2^+$	$2_1^+$	$4_1^+$
$e - e$	HFB	1.375	1.912 (0.645)	1.176 (0.251)	1.379 (0.315)
	$pn$ -no	0.853	1.366 (0.631)	0.759 (0.148)	0.831 (0.294)
	$pn$ -yes	0.628	1.277 (0.746)	0.537 (0.137)	0.610 (0.178)
Núcleo	aprox. PGCM	g.s.	$1^{st}$ exc.	$2^{nd}$ exc.	$3^{rd}$ exc.
$e - o$	HFB	0.979	0.951 (0.231)	0.826 (0.234)	0.865 (0.580)
	$pn$ -no	0.793	0.751 (0.144)	0.690 (0.191)	0.716 (0.211)
	$pn$ -yes	0.564	0.571 (0.106)	0.604 (0.123)	0.565 (0.128)
$o - o$	HFB	1.139	1.156 (0.542)	1.260 (0.487)	1.067 (0.446)
	$pn$ -no	0.945	1.123 (0.744)	1.237 (0.718)	1.074 (0.729)
	$pn$ -yes	0.637	0.805 (0.508)	1.114 (0.752)	1.005 (0.748)

Cuadro 4.3: Valores RMSD (expresados en MeV) de las distintas aproximaciones variacionales PGCM (HFB y PNVAP con y sin mezcla  $pn$ ) con respecto de los resultados exactos para los núcleos par-par ( $e - e$ ), par-impar ( $e - o$ ) e impar-impar ( $o - o$ ). Para los estados excitados, los números de la izquierda y derecha indican la desviación con respecto los valores de la energía absoluta y de excitación, respectivamente.

para los estados excitados  $2_1^+$  y  $4_1^+$  en todos los casos. Este acuerdo, sin embargo, es ligeramente peor para el estado  $0_2^+$ , aunque el comportamiento cualitativo de esta cantidad se describe adecuadamente. Si bien, existen algunos núcleos en el que las diferencias son notablemente mayores, como es el caso del  $^{28}\text{Mg}$ ,  $^{28}\text{S}$ ,  $^{30}\text{Si}$  y  $^{30}\text{S}$ . En dichos casos, la exploración explícita de todos los posibles canales de apareamiento y/o la inclusión explícita de excitaciones de cuasipartícula en el conjunto de funciones de onda podría ser necesaria[120–122].

En las tres últimas columnas del Cuadro 4.3 se muestra el RMSD del total de energías de excitación de los estados  $0_2^+$ ,  $2_1^+$  y  $4_1^+$ . A grandes rasgos, vemos que el esquema PNVAP-PGCM con estados que permiten la mezcla  $pn$  se acercan más a los valores exactos que los otros dos métodos, tanto para el estado fundamental como para dichos estados excitados. La única excepción encontrada ha sido las energías de los estados  $0_2^+$ , cuya descripción es ligeramente peor, debido a que la inclusión de las correlaciones  $pn$  reducen en mayor medida las energías del estado fundamental. Desde un punto de vista más general, también podemos observar que las energías de excitación (valores relativos, referidos al estado fundamental de cada isótopo, mostrados entre paréntesis) se reproducen mejor en comparación con el valor total,

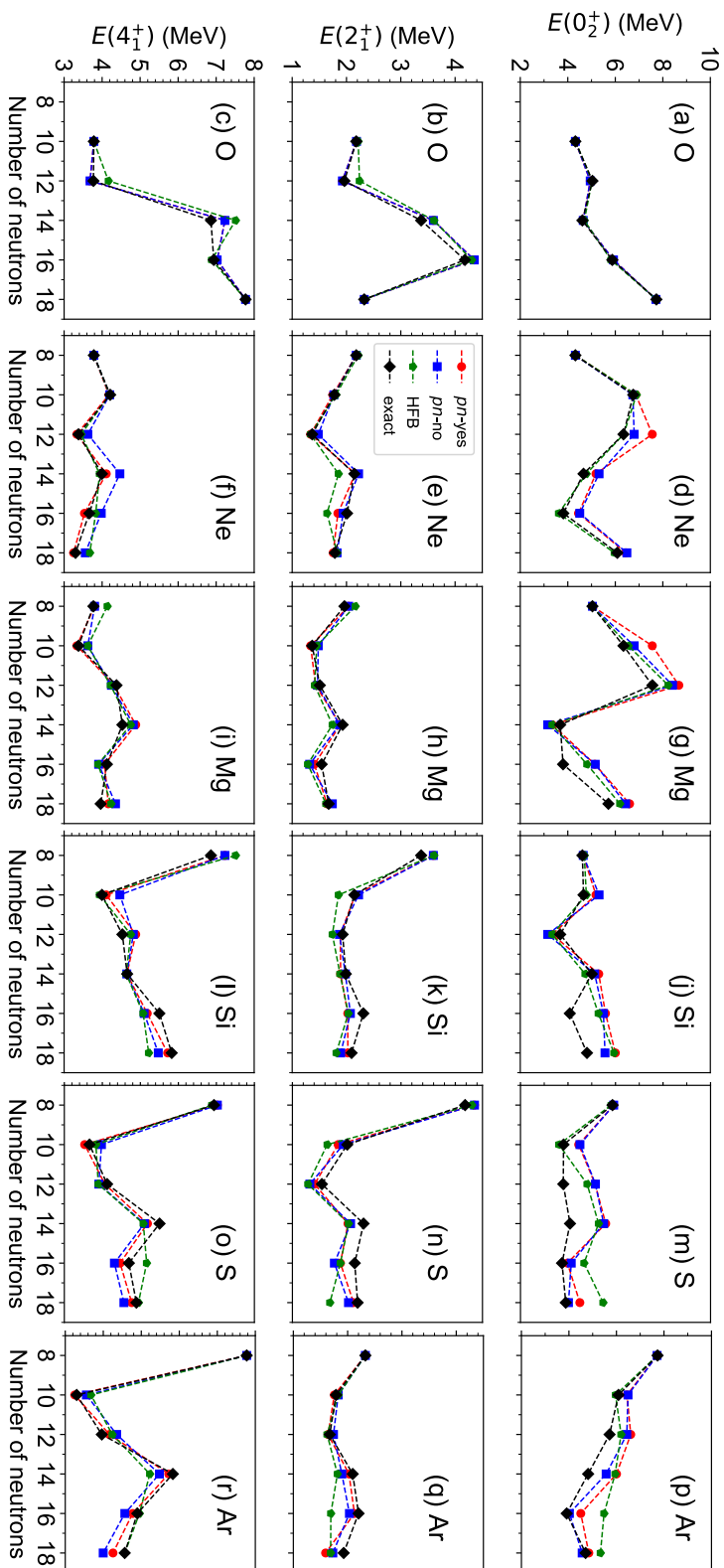


Figura 4.15: Energías de los estados  $0_2^+$  (paneles superiores),  $2_1^+$  (paneles intermedios) y  $4_1^+$  (paneles inferiores) de los núcleos par-par en la capa  $sd$  calculados exactamente (diamantes negros), usando PNVAP-PGCM con mezcla  $pn$  (puntos rojos), PNVAP-PGCM sin mezcla  $pn$  (cuadrados azules) y HFB-PGCM (pentágonos verdes).

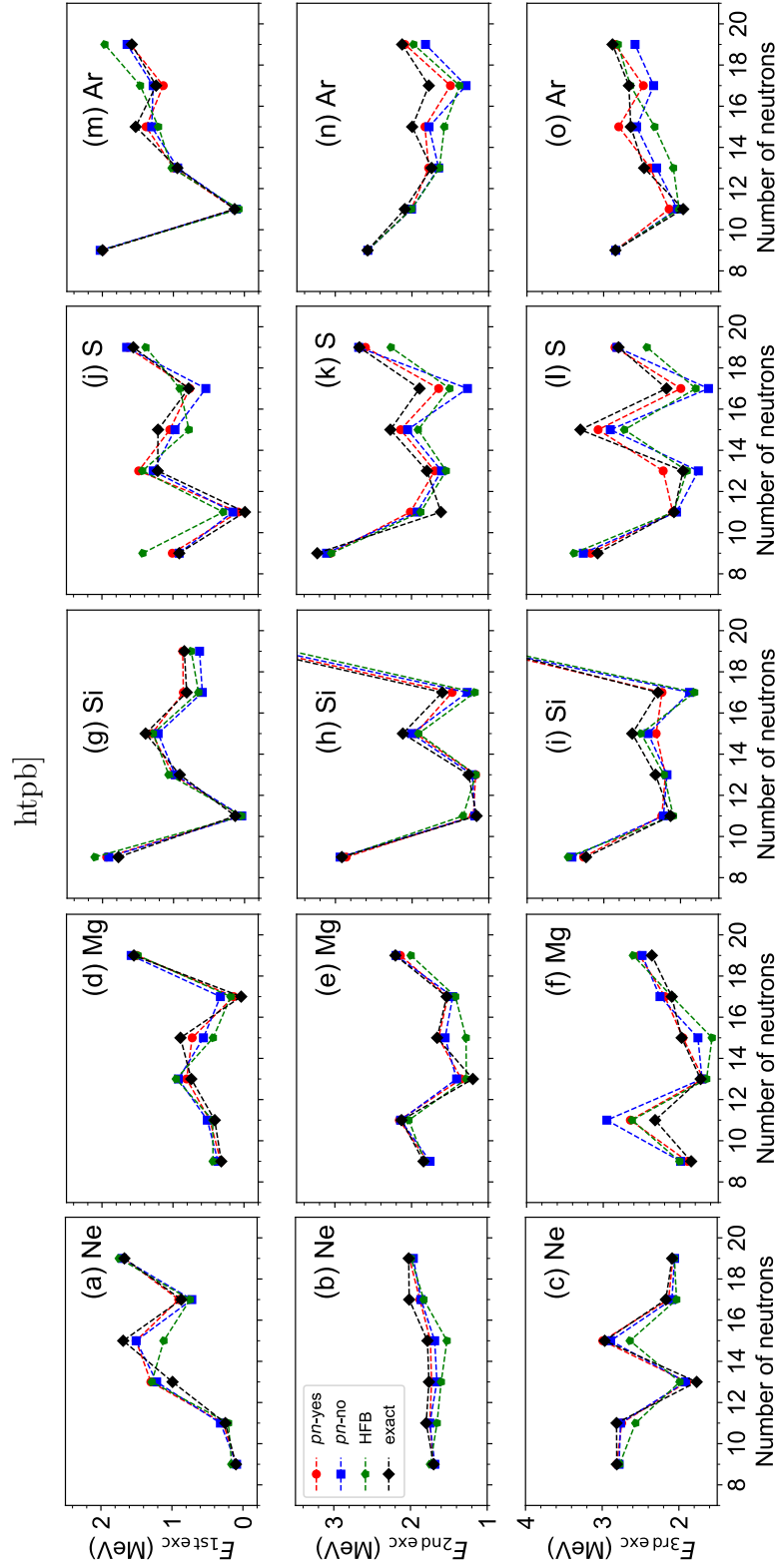


Figura 4.16: Energías del primer (paneles superiores), segundo (paneles intermedios) y tercer (paneles inferiores) estado excitado de los núcleos par-impar en la capa  $sd$  calculados exactamente (diamantes negros), usando PNVAP-PGCM con mezcla  $pn$  (puntos rojos), PNVAP-PGCM sin mezcla  $pn$  (cuadrados azules) y HFB-PGCM (pentágonos verdes).

dato que presentan RMSD más pequeños.

También observamos un gran acuerdo en los resultados para los isótopos par-impar (Fig. 4.16). En este caso, se han mostrado las energías de excitación de los tres estados más bajos obtenidas con la diagonalización exacta. Cabe destacar que el valor del momento angular de estos estados obtenidos con PGCM se corresponde en todo momento con el del cálculo del modelo de capas. Como puede verse en el Cuadro 4.3, el RMSD para la energía asoluta y de excitación de los tres primeros estados son ligeramente más pequeños cuando se tiene en cuenta la mezcla  $pn$ , hecho, por tanto, consistente con los resultados par-par. Además, el RMSD de estas energías de excitación es del orden de 100 keV, por lo que el error es notablemente pequeño.

Las principales diferencias, sin embargo, aparecen en el caso de los isótopos impar-impar. En relación con la descripción de los momentos angulares del estado fundamental y primer estado excitado, vemos que el método PNVAP-PGCM es superior al HFB-PGCM. En efecto, como se ha mencionado previamente, el cálculo PNVAP-PGCM es capaz de reproducir el momento angular del estado de menor energía en todos los núcleos a excepción del  $^{34}\text{Cl}$ , mientras que usando HFB-PGCM se han encontrado diferencias en el  $^{26}\text{F}$  ( $^{26}\text{Cl}$ ),  $^{28}\text{Na}$  ( $^{28}\text{K}$ ),  $^{32}\text{Al}$  ( $^{32}\text{K}$ ),  $^{34}\text{Cl}$  y el  $^{34}\text{P}$  ( $^{34}\text{K}$ ). Además, también observamos discrepancias para el primer estado excitado del  $^{26}\text{F}$  ( $^{26}\text{Cl}$ ),  $^{28}\text{Na}$  ( $^{28}\text{K}$ ),  $^{26}\text{Al}$  y  $^{34}\text{Cl}$  en todas las aproximaciones variacionales, del  $^{28}\text{Na}$  ( $^{28}\text{Cl}$ ) para el caso PNVAP-PGCM sin mezcla  $pn$  y HFB-PGCM y, finalmente, en el  $^{30}\text{Na}$  ( $^{30}\text{K}$ ) en los resultados HFB-PGCM.

En la mayoría de los casos, los estados con los mismos números cuánticos que el primer estado excitado exacto aparecen muy cerca del obtenido con las aproximaciones variacionales. Sin embargo, hay algunas excepciones, como el caso de los  $0_1^+$  en los núcleos  $N = Z$  que son estados isobáricos análogos<sup>2</sup> a los estados con  $M_T = 0$  del triplete  $T = 1$ . Los métodos variacionales implementados en TAURUS, sin embargo, no son capaces de reproducir correctamente dichos estados. A modo de ejemplo, baste con mencionar el estado fundamental del  $^{34}\text{Cl}$  o el primer estado excitado del  $^{26}\text{Al}$  y el segundo del  $^{30}\text{P}$  (que no se muestra).

Con el objetivo de mejorar la descripción PGCM de estos estados, se ha realizado cálculos en los que el conjunto de funciones de onda intrínsecas presentan diferentes

---

<sup>2</sup>Estados con el mismo  $J^\pi$  y  $T$  dentro de una cadena isobárica.

valores en  $(\beta_2, \gamma)$  y  $\left(\delta_{M J_p=0 M T_p=0}^{J_p=0 T_p=1}, \delta_{M J_p=0 M T_p=0}^{J_p=1 T_p=0}\right)$ . Los resultados obtenidos para estos isótopos se pueden ver en la Fig. 4.17, donde se observan mayores desviaciones en las anteriores aproximaciones, esto es,  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{26}\text{Al}$ ,  $^{34}\text{Cl}$ ,  $^{28}\text{Na}$  y  $^{28}\text{Cl}$ .

Mientras que el efecto sobre los distintos estados fundamentales –mostrados en la Fig. 4.14– no es significativo (a excepción del  $^{34}\text{Cl}$ , donde la ganancia es de 0.6 MeV aproximadamente), en la descripción de los primeros estados excitados sí que se perciben diferencias notables. En efecto, ahora los isótopos  $^{22}\text{Na}$ ,  $^{28}\text{Na}$  y  $^{28}\text{Cl}$  presentan resultados muy cercanos a la energía exacta. En estos casos, el estado fundamental y primer excitado son  $(3_1^+, 1_1^+)$  para el primer isótopo y  $(2_1^+, 1_1^+)$  para los otros dos. Aquí, los estados isobáricos análogos no están involucrados.

Para el resto de núcleos  $N = Z$ , se observa una mejora significativa de las energías de excitación PGCM, pero los resultados siguen estando considerablemente lejos de la energía exacta, por lo que deberán añadirse más correlaciones en la función de onda nuclear. Estas correlaciones podrían ser incluidas explorando explícitamente las excitaciones de cuasipartícula. Sin embargo, dado que estos estados  $0^+$  presentan  $T = 1$  y la interacción USD preserva isoespín, es muy probable que la proyección a este último número cuántico mejore notablemente la descripción de los estados análogos isobáricos.

En cuanto al efecto de permitir la mezcla  $pn$ , analizando los valores RMSD de las energías absolutas y de excitación para los tres primeros estados en los núcleos impar-impar, vemos que la aproximación PGCM sin mezcla  $pn$  es de nuevo peor que la que incluye estas correlaciones.

Por último, centramos la atención en la descripción de las propiedades electromagnéticas, tomando como ejemplo la cadena isotópica del Ne. En la Fig. 4.18 se muestra la probabilidad de transición  $B(E2, 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$  y  $B(M1, 3_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  para los isótopos pares y  $B(E2, J_{1\text{st exc}}^+ \rightarrow J_{g.s.}^+)$  y  $\mu(J_{g.s.}^+)$  para los impares, donde  $g.s.$  denota estado fundamental (*ground state*), y 1st exc primer estado excitado. Estas cantidades se han calculado con las cargas efectivas habituales (1.5 y 0.5 para protones y neutrones, respectivamente) y el factor  $g$  del nucleón desnudo (ver Apéndice A).

De modo similar a las energías discutidas, el acuerdo entre los resultados PGCM y exacto es bastante bueno, especialmente en los isótopos impares. De hecho, no se encuentran grandes diferencias entre los resultados que permiten o no la mezcla  $pn$ , a

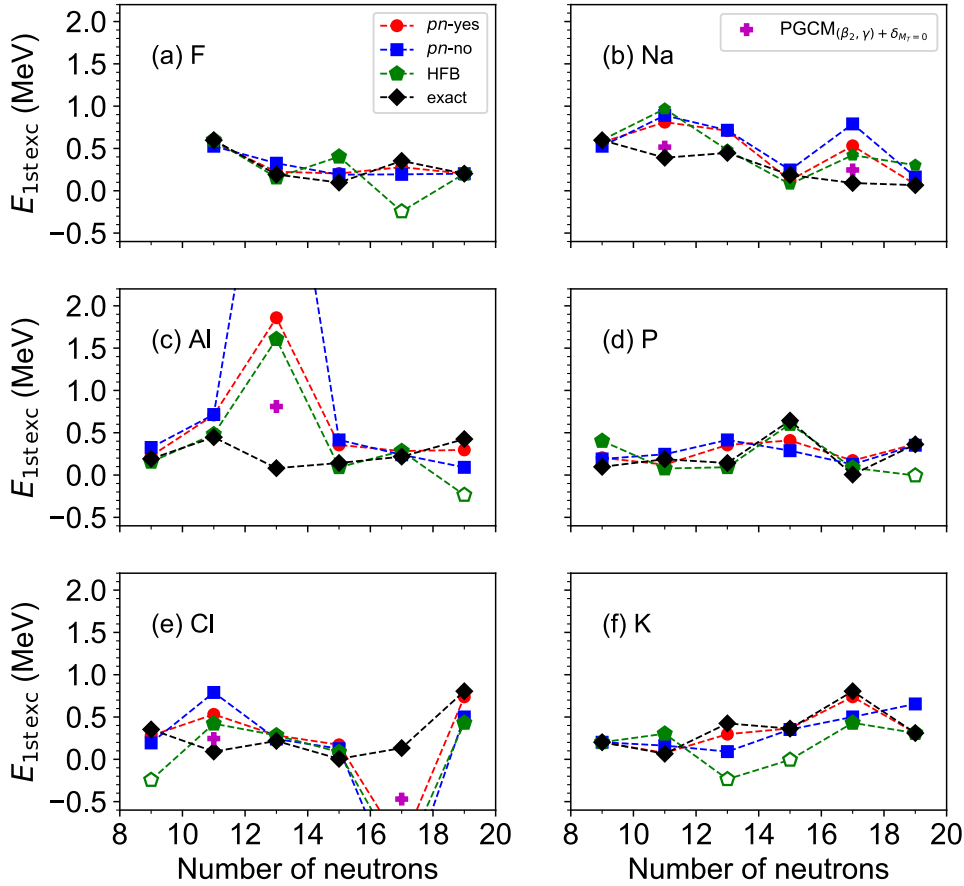


Figura 4.17: Energías del primer estado excitado de los núcleos impar-impar en la capa  $sd$  calculados exactamente (diamantes negros), usando HFB-PGCM (pentágonos verdes) y PNVAP-PGCM con mezcla  $pn$  (puntos rojos) y sin mezcla (cuadrados azules). El momento angular usado como estado fundamental y primer estado excitado son aquellos obtenidos con la diagonalización exacta. Los símbolos vacíos indican aquellos casos en los que no coincide el momento angular exacto con el obtenido variacionalmente. Las cruces magenta muestran los resultados PGCM incluyendo como coordenada generadora el apareamiento con  $M_{T_p} = 0$  junto con  $(\beta_2, \gamma)$ .

excepción de la probabilidad  $B(M1)$ , donde la primera aproximación PNVAP-PGCM es mejor. Además, se observa que el cálculo HFB-PGCM no es capaz de producir buenos resultados debido a la pobre descripción de los estados  $3_1^+$ . En cualquier caso, el comportamiento cualitativo de los resultados exactos se describe correctamente a pesar de que los valores PGCM sean sistemáticamente mayores menores para la

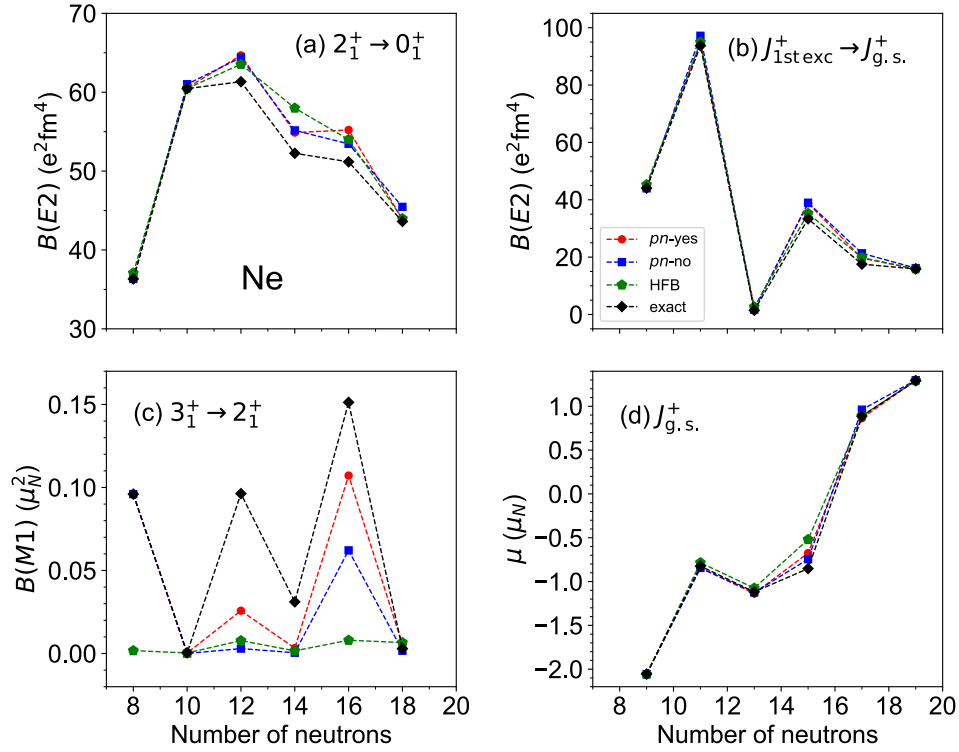


Figura 4.18: Propiedades electromagnéticas calculadas con HFB-PGCM (pentágonos verdes), PNVAP-PGCM con (puntos rojos) y sin mezcla  $pn$  (cuadrados azules) para algunos estados en los isótopos de Ne: (a)  $B(E2, 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$  para los casos par-par; (b)  $B(E2, J_{1st\ exc}^+ \rightarrow J_{g.s.}^+)$  para los casos par-impar; (c)  $B(M1, 3_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  para los par-par; (d) momento dipolar magnético,  $\mu$  para el estado fundamental de los isótopos par-impar.

$B(E2)$  [ $B(M1)$ ]. Estas discrepancias podrían ser reducidas si se consigue describir mejor los estados excitados involucrados a través de la inclusión de un mayor número de grados de libertad.

### 4.3. Resumen

Para sintetizar lo expuesto anteriormente, se ha evaluado la capacidad de distintas aproximaciones variacionales, posibles gracias al código TAURUS, comparando sistemáticamente los resultados obtenidos con los análogos exactos, dados por AN-



TOINE, en todos los posibles núcleos de la capa  $sd$  con la interacción USD. En efecto, se han tenido en cuenta los núcleos par-par, par-impar e incluso impar-impar, siendo estos dos últimos habitualmente poco tratados dentro las aproximaciones basadas en los vacíos de cuasipartículas de Bogoliubov.

Además, para entender mejor el papel de las distintas correlaciones en juego en los sistemas nucleares, se han considerado distintos métodos variacionales, desde la aproximación de campo medio HFB, mejorando la descripción con PNVAP e incluyendo correlaciones más allá de campo medio con el cálculo PGCM completo, gracias a la proyección a buenos números cuánticos y mezcla de configuraciones. Para cada caso, también se han considerado distintas funciones de onda prueba, diferenciadas por las simetrías intrínsecas autoconsistentes. En particular, se han comparado los vacíos que surgen de las minimizaciones HFB y PNVAP que incluyen o no la mezcla de estados monoparticulares de protones y neutrones.

Para determinar el papel que desempeña dicha mezcla, se han tomado las correlaciones de apareamiento  $pn$  como coordenada generadora en los canales isovectorial e isoescalar, que habitualmente no se tienen en cuenta en los cálculos del generador.

Por último, es necesario destacar que los vacíos con distinta paridad del número, tanto par como impar, se han tratado con el mismo formalismo, esto es, con la resolución de las ecuaciones HFB y PNVAP.

De lo anterior, podemos extraer algunas conclusiones:

1. Además de ser variacionalmente mejores, los vacíos generales de Bogoliubov que rompen todo tipo de simetrías presentan la gran ventaja de converger con mayor frecuencia en los mínimos absolutos. Esto, por tanto, simplifica enormemente el trabajo para la obtención de los diversos estados intrínsecos HFB/PNVAP.
2. Los vacíos de Bogoliubov con mezcla  $pn$  pueden ser utilizados para describir sistemas impar-impar con la aproximación PNVAP, sin necesidad de incluir explícitamente excitaciones de dos cuasipartículas. Sin embargo, los cálculos HFB en estos núcleos producen falsos estados impar-impar, conteniendo únicamente autoestados par-par de los operadores de número de protones y neutrones.

3. El esquema PNVAP es capaz de tratar las correlaciones de apareamiento de un modo más riguroso, sin tener que incluir ligaduras adicionales en el proceso de minimización. En efecto, este método evita el colapso de las correlaciones de apareamiento, a menudo encontradas en cálculos HFB, donde la interacción de apareamiento es pequeña, como es el caso de cierres de capa o sistemas impares. También, cuando se permite la mezcla  $pn$  el método PNVAP es capaz de incluir simultáneamente correlaciones de apareamiento isovectoriales ( $pp$ ,  $nn$  y  $pn$  e isoescalares ( $pn$ ) en los estados intrínsecos. En el caso de los cálculos HFB (sin incluir ligaduras), sin embargo, los estados obtenidos solo presentan un único tipo de correlaciones a la vez.
4. Los métodos variacionales que se basan en la minimización PNVAP y que exploran el espacio de los vacíos de cuasipartícula con mezcla  $pn$  producen los mejores resultados para el estado fundamental y las energías de excitación, así como para las propiedades electromagnéticas. En concreto, la mejor aproximación variacional encontrada ha sido el cálculo PGCM que explora los parámetros de deformación como coordenadas colectivas y estado intrínsecos con correlaciones de apareamiento  $pn$ . Sin embargo, se ha observado que el efecto de incluir dichas correlaciones es menos relevante en el cálculo PGCM en comparación con el cálculo puro PNVAP basado en un solo estado intrínseco.
5. El esquema PGCM es capaz de reproducir sorprendentemente bien los resultados exactos incluso en los sistemas a mitad de capa donde el espacio de Hilbert presenta una dimensión mayor. Este buen acuerdo se observa para los estados fundamentales y excitados, además de las propiedades electromagnéticas, especialmente cuando se emplea PNVAP con estados que presentan la mezcla  $pn$ . Aún con esto, existen discrepancias para algunas energías, transiciones y núcleos con  $N = Z$  impar-impar. En estos últimos, se ha observado la pobre descripción de los  $0_1^+$  de los estados isobáricos análogos. Utilizando los distintos canales de apareamiento como coordenadas generadoras, no obstante, se observa una mejoría en los resultados.



---

## Capítulo 5

# Comparación de resultados PGCM II: Cadena isotópica del Ca en la capa $pf$

En el capítulo anterior se exploró la capacidad del método PGCM para describir –si bien a grandes rasgos– la estructura nuclear de distintos tipos de sistemas en un espacio de valencia reducido. Se vio que, en general, los estados fundamentales, los estados excitados de más baja energía, así como algunos observables de naturaleza espectroscópica se describen en mejor medida según se consideran esquemas variacionales más sofisticados y funciones de onda que rompen un mayor número de simetrías.

Por tanto, una vez justificado el método PGCM, tomamos ahora un espacio de valencia de mayor tamaño que permite la inclusión de un mayor número de partículas. En particular, se ha considerado la cadena isotópica del Ca que puede ser descrita en la capa  $pf$ , utilizando la interacción KB3G[59] para la comparación directa entre los resultados variacionales y los resultados obtenidos con la diagonalización exacta. Además, se hará un análisis más exhaustivo de la estructura de los distintos isótopos utilizando diferentes esquemas variacionales que exploren un mayor número de grados de libertad, en particular, tomarán especial importancia las correlaciones de apareamiento  $nn$ . Dado que en estos núcleos no hay protones de valencia, se espera que una buena aproximación PGCM no requiera un excesivo número de funciones de

onda intrínsecas, pues la función de onda exacta ahora presentará un menor número de correlaciones.

## 5.1. Descripción de la estructura del $^{48}\text{Ca}$

Al igual que en las cadenas de la capa  $sd$ , se ha obtenido un conjunto de estados intrínsecos con ligaduras en  $(\beta_2, \gamma)$  y resolviendo las ecuaciones HFB/PNVAP, lo que nos permite construir la función de ondas GCM una vez se han proyectado a buenos números cuánticos.

### 5.1.1. Superficies de energía y correlaciones de apareamiento $nn$

La energía total en función de los dos grados de libertad anteriores se puede ver en la Fig. 5.1. En el panel superior, se representan las superficies HFB –panel (a)) y PNVAP (panel (b)). Como era de esperar, dado que es un núcleo doblemente mágico, el mínimo absoluto se sitúa en la configuración esférica y la energía asciende rápidamente con  $\beta_2$ . Además, en ambos casos, se puede ver que este comportamiento es prácticamente independiente del valor de  $\gamma$ . Cabe destacar que las energías obtenidas con PNVAP presentan una distribución ligeramente más suave en comparación con la HFB. Se ha observado en el cálculo HFB que el apareamiento desaparece en el estado esférico, reduciéndose el problema a una minimización de tipo HF. Sin embargo, al minimizar funciones de onda proyectadas a buen número de partículas, estas correlaciones no desaparecen lo que genera en torno a 750 keV de energía.

Sin embargo, las principales diferencias surgen cuando se restauran las simetrías de número de partículas y momento angular ( $J = 0$ ). En el caso de la aproximación PNVAP+PNAMP (panel (d)), se obtiene un intervalo  $\beta_2 \in [0.0, 0.1]$  donde la superficie es plana, independientemente del valor de  $\gamma$ . Esto implica que la ganancia en energía es pequeña en comparación con el mínimo esférico obtenido previamente.

Por otro lado, con la aproximación HFB+PNAMP –panel (c)–, aunque también se observa ese efecto de allanamiento de la superficie, el mínimo absoluto se encuentra en regiones de mayor deformación prolada. Así, la ganancia en energía es mayor (en torno a 740 keV) debido a la proyección a buen número de partículas, la cual no se

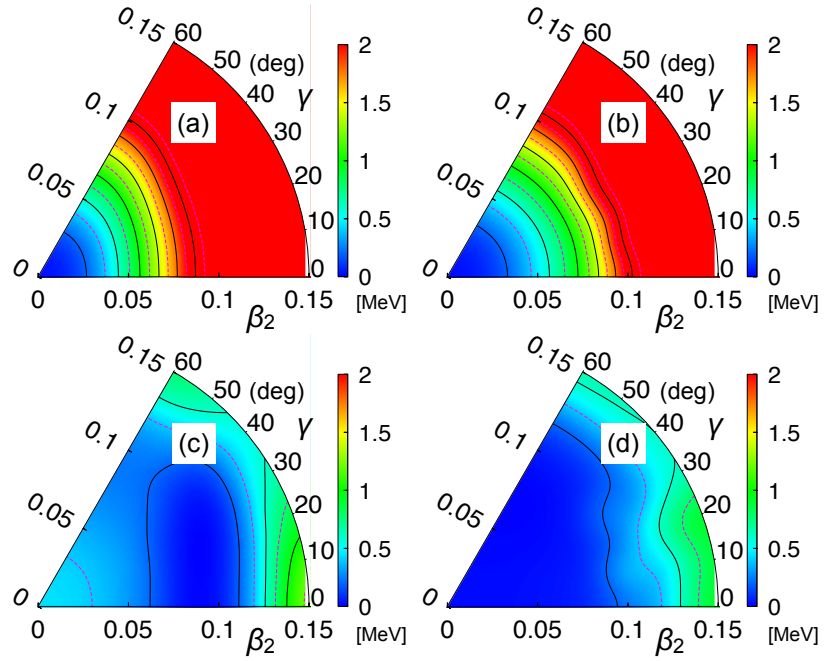


Figura 5.1: Superficies de energía total en función de los grados de libertad cuadrupolares ( $\beta_2, \gamma$ ) calculadas usando las aproximaciones: (a) HFB, (b) PNVAP, y sus respectivas proyecciones a buen momento angular ( $J = 0$ ) y de partículas, esto es, (c) HFB+PNAMP y (d) PNVAP+PNAMP. Las superficies están normalizadas a sus respectivos mínimos. (a) -6.446 MeV, (b) -7.195 MeV, (c) -6.896 MeV y (d) -7.209 MeV.

ha tenido en cuenta en el cálculo HFB. Aun así, dicha ganancia sigue estando a unos 300 keV por encima de la obtenida con el cálculo PNVAP+PNAMP.

Nos centramos ahora en el papel de las correlaciones de apareamiento  $nn$ . Para visualizar mejor la influencia de este grado de libertad se representa en la Fig. 5.2 los resultados del cálculo PNVAP con ligaduras en la deformación cuadrupolar axial ( $\beta_2, \gamma = 0, 180^\circ$ ) y el contenido de apareamiento isovectorial  $\delta_{nn}$ . También se ha representado la energía de apareamiento intrínseco –sin proyección–  $nn$ , dado por  $E_{pair} = -\frac{1}{2}\text{Tr}(\Delta\kappa^*)$ . Esta última cantidad se ha obtenido utilizando el tensor de apareamiento definido entre estados sin proyectar, esto es,  $\kappa_{ab} = \langle\phi|c_b c_a|\phi\rangle$ .

Se demuestra así que la energía de apareamiento aumenta según aumenta el valor de  $\delta_{nn}$  y, más interesante aún, que dicha energía es independiente del grado de deformación axial. Este comportamiento ya se había observado anteriormente en

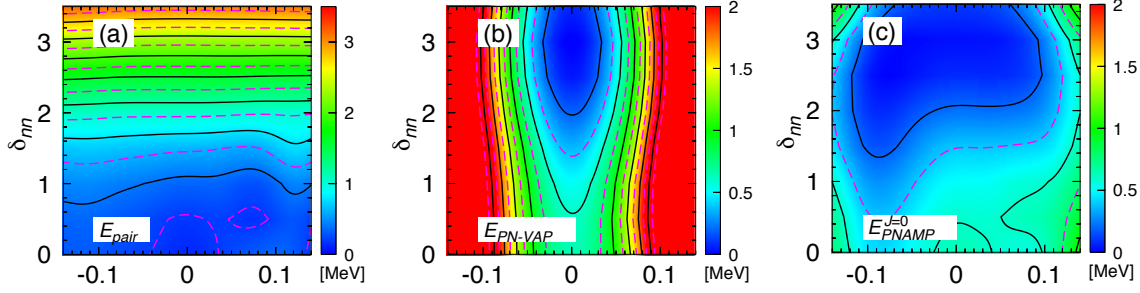


Figura 5.2: Superficies de energía total en función de los grados de libertad cuadrupolares ( $\beta_2, \gamma$ ) calculadas usando las aproximaciones: (a) HFB, (b) PNVAP. y sus respectivas proyecciones a buen momento angular ( $J = 0$ ) y de partículas, esto es, (c) HFB+PNAMP y (d) PNVAP+PNAMP. Las superficies están normalizadas a sus respectivos mínimos. (a)  $-6.446$  MeV, (b)  $-7.195$  MeV, (c)  $-6.896$  MeV y (d)  $-7.209$  MeV.

isótopos más ligeros de la capa  $sd$  y en cálculos con la interacción de Gogny[123]. En cuanto a la energía total –paneles (b) y (c)–, se aprecia un comportamiento similar al de la superficie  $(\beta_2, \gamma)$  cuando se compara el cálculo PNVAP con la proyección a  $J = 0$ , donde el mínimo global se desplaza a regiones más deformadas. Sin embargo esta superficie presenta una mayor suavidad en la dirección del apareamiento. Además, la proyección a momento angular aplanan aún más la superficie, apareciendo una región de mínima energía para un alto contenido de apareamiento en el entorno de  $\beta_2 \in [-0.1, 0.1]$

La diferencia de energías, no obstante, entre los mínimos de ambas superficies es bastante pequeña (aproximadamente 26 keV). Este comportamiento, junto con la degeneración encontrada en la superficie  $(\beta_2, \gamma)$  proyectada sugiere que estos tres grados de libertad deben ser tenido en cuenta simultáneamente en el cálculo GCM.

### 5.1.2. Espectro de energías y probabilidades de transición

Una vez obtenidos los estados intrínsecos, se ha procedido al cálculo PGCM completo, con tres esquemas distintos:

1. PGCM<sub>1</sub>: Se han usado como coordenadas colectivas los parámetros de deformación  $(\beta_2, \gamma)$ . Los estados intrínsecos se han obtenido resolviendo las ecuaciones HFB.

2. PGCM<sub>2</sub>: Se han usado como coordenadas colectivas los parámetros de deformación  $(\beta_2, \gamma)$ . Los estados intrínsecos se han obtenido resolviendo las ecuaciones PNVAP.
3. PGCM<sub>3</sub>: Se han usado como coordenadas colectivas los parámetros de deformación  $(\beta_2, \gamma)$  y la amplitud de correlaciones neutrón-neutrón,  $\delta_{nn}$ . Los estados intrínsecos se han obtenido resolviendo las ecuaciones PNVAP.

En la Fig. 5.3 se han representado los autovalores de más baja energía para los estados con  $J = 0, 2, 3, 4, 6$  obtenidos con los tres generadores anteriores junto con la solución dada por el cálculo del modelo de capas.

Se puede apreciar una leve mejora de los resultados cuando se pasa de utilizar estados HFB a PNVAP, esto es, del cálculo PGCM<sub>1</sub> al PGM<sub>2</sub>. Además, la exploración explícita de las correlaciones de apareamiento isovectoriales en el canal  $nn$  hace que los resultados se acerquen aún más a los autovalores exactos. De hecho, la diferencia en el estado fundamental entre éste último esquema PGCM y el cálculo ISM es de aproximadamente 119 keV.

En cuanto a la reproducción de la estructura de estados excitados con mayor momento angular, vemos que estas aproximaciones no son tan buenas. En particular, se observa que el estado  $3^+$  es bastante sensible a la elección del generador escogido. En efecto, la inclusión del grado de libertad  $\delta_{nn}$  hace que este autovalor disminuya en torno a 2 MeV.

Complementariamente, también se han calculado las transiciones y momentos cuadrupolares más relevantes asociados a las bandas anteriores. Los resultados, mostrados en el Cuadro 5.1, muestran una leve sobreestimación de los resultados exactos en la mayoría de casos. El cálculo PGCM<sub>3</sub> es, como era de esperar, el que más se acerca a los valores ISM, siendo éstos los más bajos de las tres aproximaciones variacionales. No obstante, el mayor salto en los valores aproximados se observa –en la mayoría de casos– cuando las correlaciones de apareamiento se describen con mayor grado de fidelidad, esto es, cuando se emplean estados PNVAP en lugar de HFB.



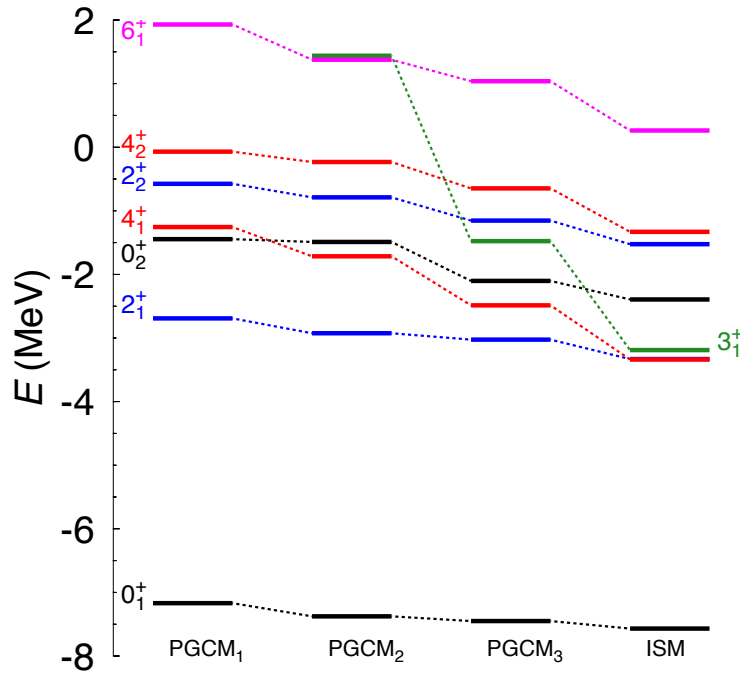


Figura 5.3: Espectro de energías para el  $^{48}\text{Ca}$  calculado con exactamente y con el método PGCM con las diferentes mallas de estados.

### 5.1.3. Funciones de onda colectivas y números de ocupación

Se analizan ahora dos últimos aspectos de la función de ondas nuclear obtenida con el marco PGCM, esto es, la colectividad y números de ocupación de partícula independiente en las diferentes órbitas esféricas.

En la Fig. 5.4 se han representado las funciones de onda colectivas para los estados de menor energía  $J^\pi = 0^+, 2^+$  y  $4^+$  en la aproximación PGCM<sub>2</sub>. De modo similar a los cálculos previos, vemos que el estado fundamental presenta una superficie prácticamente plana en todo el plano de coordenadas colectivas de deformación cuadrupolares, si bien el estado esférico es el que presenta un mayor peso, en torno a un 2.5%. Estos resultados son consistentes con la degeneración encontrada en la superficie de energía total proyectada a  $J = 0$ .

En cuanto a la función de ondas del estado  $2_1^+$ , también se aprecia un cierto grado de suavidad, encontrando aquí claramente una mezcla de estados con deformación oblada y triaxial con  $\gamma = 20^\circ$  en el límite de la coordenada  $\beta_2$ .

	PGCM <sub>1</sub>	PGCM <sub>2</sub>	PGCM <sub>3</sub>	ISM
$B(E2 : 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$	12.7	12.7	12.7	11.5
$B(E2 : 2_1^+ \rightarrow 0_2^+)$	0.8	0.9	1.0	1.0
$B(E2 : 2_2^+ \rightarrow 0_1^+)$	0.0	0.0	0.0	0.0
$B(E2 : 2_2^+ \rightarrow 0_2^+)$	30.4	24.5	23.0	21.6
$B(E2 : 4_1^+ \rightarrow 2_1^+)$	5.6	5.7	2.5	2.0
$Q(2_1^+)$	+5.0	+4.8	+4.4	+4.1
$Q(2_2^+)$	-11.4	-9.8	-9.3	-8.6
$Q(4_1^+)$	+10.8	+9.1	+8.3	+7.5

Cuadro 5.1: Probabilidades de transición reducidas  $B(E2)$  y momentos cuadrupolares eléctricos espectroscópicos,  $Q$ , calculados con los diferentes métodos usando las cargas efectivas 1.5 y 0.5 para protones y neutrones, respectivamente. Las unidades para las transiciones son  $e^2\text{fm}^4$  y para los momentos  $\text{efm}^2$ .

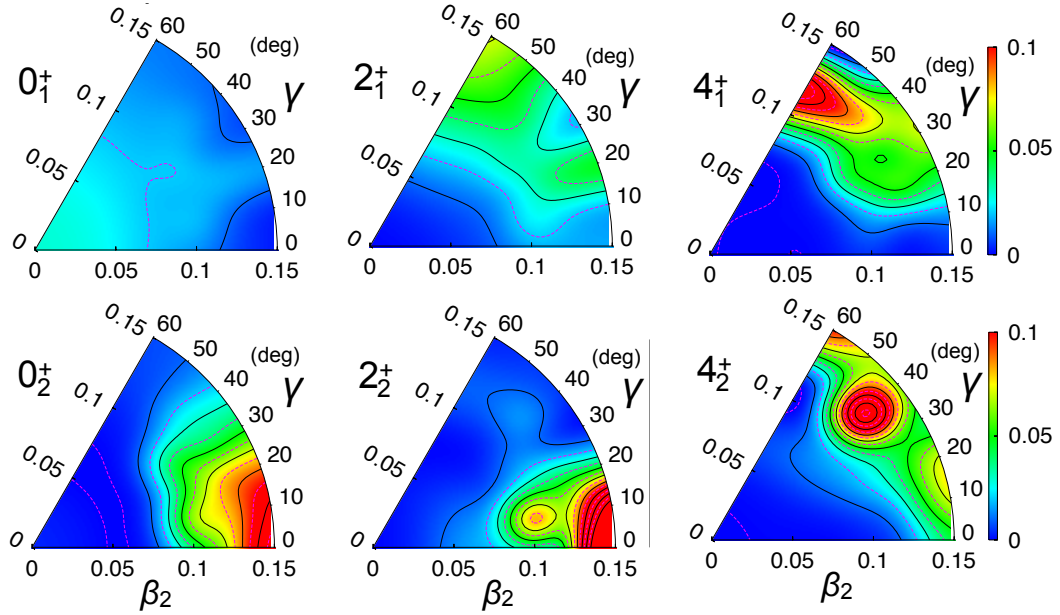


Figura 5.4: Funciones de onda colectivas  $|F_\sigma^\Gamma(\beta_2, \gamma)|^2$  para los estados más bajos  $0^+$ ,  $2^+$  y  $4^+$  del  $^{48}\text{Ca}$  en la aproximación PGCM<sub>2</sub>.

Para el resto de estados de mayor energía, la colectividad de la función de onda está también localizada en los límites del plano, presentando además unos picos pronunciados en unos pocos puntos de la malla de estados intrínsecos. Esto implica

que solamente esos pocos estados son los que contribuyen a construir la función de ondas que describe estos estados excitados.

También cabe destacar la predominancia de la deformación prolada en los estados con  $\sigma = 2$ <sup>1</sup>.

En cuanto a los estados  $4_1^+$  y  $4_2^+$ , la función de ondas está prácticamente localizada en regiones alta deformación con  $\gamma = 60^\circ, 40^\circ$ , respectivamente.

Es importante recalcar que las configuraciones proladas y obladas aquí encontradas son plenamente consistentes con los valores de los momentos cuadrupolares espectroscópicos mostrados en el apartado anterior. Por ejemplo, el estado  $2_2^+$  que es predominantemente prolado, presenta un valor  $Q(2_2^+)$  negativo.

Conclusiones similares podemos extraer de la colectividad obtenida con el esquema PGCM<sub>3</sub>. Para simplificar este análisis, se han considerado los puntos del plano  $(\beta_2, \delta_{nn})$  para estados con simetría axial, esto es, fijando  $\gamma = 0^\circ, 60^\circ$ . En efecto, la superficie asociada al estado fundamental es casi plana en la región  $\beta_2 \in [-0.1, 0.1]$ , con una ligera dependencia en la coordenada  $\delta_{nn}$ . Además, los estados  $0_2^+$  y  $2_2^+$  presentan dos marcados picos en el límite de la zona prolada, lo que indica la mezcla de estados con escasa y alta correlación de apareamiento  $nn$ . Esta misma topología puede observarse en la función de onda colectiva del estado  $2_1^+$ , ahora en el límite oblado, lo que es consistente con el resultados obtenidos en el cálculo PGCM<sub>2</sub>.

Es interesante notar que esta funciones de onda colectivas difieren en gran medida con las obtenidas habitualmente en cálculos EDF, donde, en general, las distribuciones encontradas son mucho más suaves en los contornos de las superficies[11, 19, 124, 125]. Una posible explicación es que en éste último tipo de cálculos se tiene acceso a muchas más órbitas de partícula independiente que pueden evolucionar con los grados de libertad colectivos.

Así, la mayor diferencia en la colectividad de estos estados surge al comparar el estado  $4_1^+$ . En efecto, A la luz de estos últimos resultados, se ve la mezcla de dos estados que no aparecía en el cálculo en  $\beta_2, \gamma$ . El primero de ellos, en la región oblada con un elevado contenido en apareamiento  $nn$ ; el segundo de ellos marcadamente prolado con un contenido notablemente inferior en pares  $nn$ . Teniendo en cuenta que en el esquema PGCM<sub>2</sub> no se ha podido describir dicha configuración, se puede

---

<sup>1</sup>También se ha encontrado este comportamiento en el estado  $4_3^+$ , si bien por simplificar este estudio no se ha incluido.

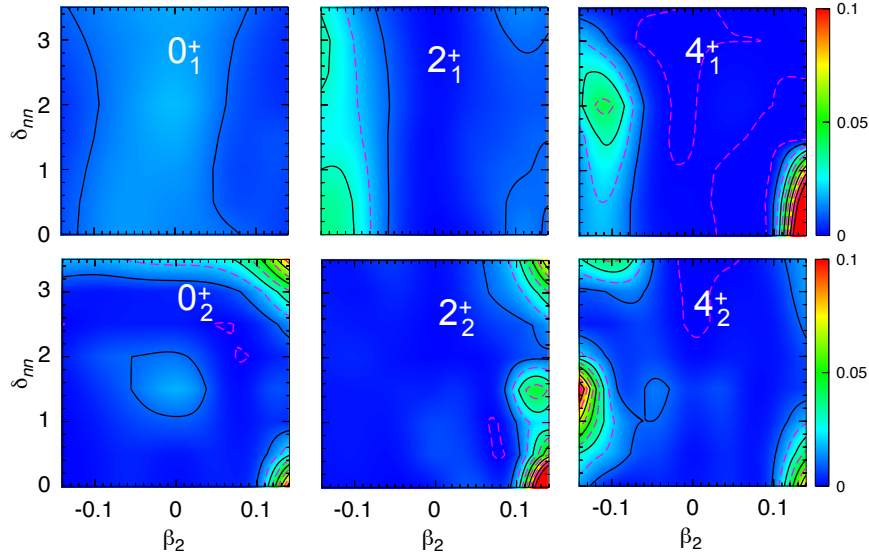


Figura 5.5: Funciones de onda colectivas  $|F_{\sigma}^{\Gamma}(\beta_2, \delta_{nn})|^2$  para los estados más bajos  $0^+$ ,  $2^+$  y  $4^+$  del  $^{48}\text{Ca}$  en la aproximación  $\text{PGCM}_3$ .

entender ahora la diferencia apreciada en la Fig. 5.3 cuando se comparan las bandas  $4_1^+$  obtenidas en los generadores  $\text{PGCM}_{1,2}$  con el  $\text{PGCM}_3$ .

Por último, para conocer mejor el contenido de las funciones de onda correlacionadas, se han calculado las ocupaciones de neutrones en las distintas órbitas con un  $j$  determinado. Además, se han comparado con las ocupaciones dadas por el cálculo ISM. Los resultados se muestran en el Cuadro 5.2.

Si bien los resultados entre las diferentes aproximaciones variacionales difieren poco, las ocupaciones que más se acercan a las exactas son las asociadas al cálculo  $\text{PGCM}_3$ . De hecho, se aprecia que éste es capaz de reproducir con gran fidelidad la estructura de partícula-hueco del estado fundamental y el resto de estados excitados mostrados. En efecto, el estado de más baja energía muestra una configuración tal que la capa  $f_{7/2}$  está prácticamente cerrada. Por otro lado, vemos que los estados  $0_2^+$  y  $2_2^+$  son excitaciones de dos partículas y dos huecos (2p-2h) en las órbitas  $f_{7/2} - p_{3/2}$ , mientras que los estados  $2_1^+$  y  $4_1^+$  muestran una estructura de solamente una partícula y un hueco en las mismas capas. Por último, el estado  $4_2^+$  exhibe una estructura también de una partícula y un hueco, pero ahora en las capas  $f_{7/2} - f_{5/2}$ .

Relacionando lo anterior con el espectro de bajas energías, vemos que aquellos

$J^{\pi\sigma}$	orbit	PGCM <sub>1</sub>	PGCM <sub>2</sub>	PGCM <sub>3</sub>	ISM
$0_1^+$	$f_{7/2}$	7.84	7.81	7.81	7.80
	$p_{3/2}$	0.10	0.08	0.08	0.07
	$f_{5/2}$	0.04	0.09	0.09	0.11
	$p_{1/2}$	0.02	0.02	0.02	0.02
$0_2^+$	$f_{7/2}$	5.89	5.84	5.84	5.82
	$p_{3/2}$	1.44	1.64	1.75	1.80
	$f_{5/2}$	0.15	0.18	0.15	0.17
	$p_{1/2}$	0.52	0.34	0.26	0.21
$2_1^+$	$f_{7/2}$	6.80	6.77	6.77	6.77
	$p_{3/2}$	1.07	1.07	1.05	1.08
	$f_{5/2}$	0.09	0.12	0.14	0.11
	$p_{1/2}$	0.04	0.04	0.04	0.04
$2_2^+$	$f_{7/2}$	5.86	5.85	5.87	5.85
	$p_{3/2}$	1.44	1.63	1.71	1.78
	$f_{5/2}$	0.15	0.14	0.12	0.13
	$p_{1/2}$	0.55	0.38	0.30	0.24
$4_1^+$	$f_{7/2}$	6.66	6.59	6.83	6.83
	$p_{3/2}$	1.15	1.12	1.06	1.03
	$f_{5/2}$	0.13	0.23	0.08	0.11
	$p_{1/2}$	0.06	0.06	0.03	0.03
$4_2^+$	$f_{7/2}$	6.63	6.60	6.79	6.82
	$p_{3/2}$	0.43	0.37	0.17	0.09
	$f_{5/2}$	0.11	0.15	0.10	0.11
	$p_{1/2}$	0.83	0.88	0.94	0.98

Cuadro 5.2: Números de ocupación calculados para los dos estados de menor energía con  $0^+$ ,  $2^+$  y  $4^+$  del  $^{48}\text{Ca}$  con ISM y los diferentes esquemas PGCM.

estados que más difieren en sus ocupaciones son, precisamente, los que sufren una mayor ganancia energética. Baste recalcar el caso del  $0_2^+$ , donde las ocupaciones en la capa  $p_{3/2}$  y  $p_{1/2}$  varían hasta en 0.3 partículas si se comparan las aproximaciones PGCM<sub>1</sub> y PGCM<sub>3</sub>.

Por tanto, las excitaciones encontradas en este núcleo, dada nuestra elección de la base, muestran claramente un origen de partícula independiente. Además, como consecuencia inmediata, vemos que los grados de libertad escogidos –esto es, deformaciones y apareamiento  $nn$ – son capaces de describir la física de este sistema. De hecho, estos resultados, junto con la topología de las funciones de onda, parecen

indicar que en este espacio de valencia (aún pequeño) estas variables son buenas herramientas para generar estados intrínsecos altamente correlacionados, por lo que, una vez más, el concepto de *colectividad* sigue siendo difícil de clarificar.

## 5.2. Generalización a toda la cadena isotópica del Ca

Centramos ahora la atención en los resultados obtenidos en la cadena de isótopos del Ca que pueden ser descritos en la capa *pf*. Al igual que el apartado y capítulo anteriores, vamos a comparar distintas aproximaciones PGCM con la solución dada por la diagonalización exacta del hamiltoniano de muchos cuerpos:

1. Mínimo HFB tomando una semilla completamente arbitraria.
2. Mínimo PNVAP tomando una semilla completamente arbitraria.
3. PGCM<sub>1</sub>: Se han usado como coordenadas colectivas los parámetros de deformación  $(\beta_2, \gamma)$ . Los estados intrínsecos se han obtenido resolviendo las ecuaciones HFB.
4. PGCM<sub>2</sub>: Se han usado como coordenadas colectivas los parámetros de deformación  $(\beta_2, \gamma)$ . Los estados intrínsecos se han obtenido resolviendo las ecuaciones PNVAP.
5. PGCM<sub>3</sub>: Se han usado como coordenadas colectivas los parámetros de deformación  $(\beta_2, \gamma)$  y la amplitud de correlaciones neutrón-neutrón,  $\delta_{nn}$ . Los estados intrínsecos se han obtenido resolviendo las ecuaciones PNVAP.

### 5.2.1. Estados fundamentales y espectros de bajas energías

En la Fig. 5.6 se muestran los estados fundamentales de los núcleos par-par y par-impar calculados exactamente y con los distintos esquemas variacionales. Podemos ver en primer lugar que los resultados son prácticamente indistinguibles en la escala que refleja la energía absoluta de los estados fundamentales. De este modo, para

visualizar mejor la exactitud de los diferentes métodos, se ha representado en el panel (b) la diferencia de energía entre el valor exacto y el valor aproximado.

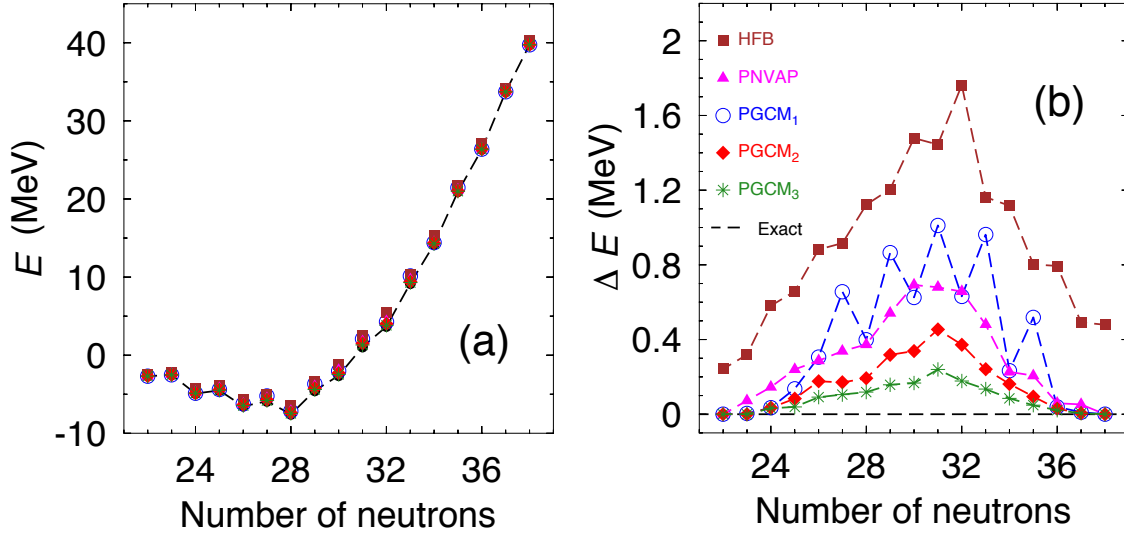


Figura 5.6: (a) Energía de los distintos estados fundamentales y (b) diferencias entre los valores aproximados y exactos calculados para la cadena de isótopos  $^{42-60}\text{Ca}$  con diferentes aproximaciones variacionales. Los resultados ISM se han representado con una línea negra discontinua.

Aquí se puede observar mayor concordancia con el valor exacto en los límites del espacio de valencia en comparación con la región intermedia. Este comportamiento, también observado en el capítulo anterior, puede entenderse en términos de la dimensión de la matriz del hamiltoniano, dado que es mayor precisamente en esta zona intermedia de la capa. Esto, por tanto, implica que habrá configuraciones que no podrán ser obtenidas explorando los grados de libertad estudiados aquí.

Como era de esperar, la peor aproximación viene dada por el simple cálculo del mínimo HFB, donde se observa un leve comportamiento de zig-zag en los núcleos impares. La menor diferencia se observa en el  $^{42}\text{Ca}$ , con un valor de 0.24 MeV, mientras que la mayor se observa en el  $^{52}\text{Ca}$ , con 1.76 MeV. Además, el comportamiento de zig-zag –o *staggering*– se amplifica en los resultados obtenidos con el cálculo PGCM<sub>1</sub>, el cual emplea precisamente funciones de onda intrínsecas de tipo HFB para construir los estados GCM. En este caso, se describen mejor los núcleos pares que sus vecinos de masa impar, salvo en los casos extremos, esto es  $^{42-45,56-58}\text{Ca}$ , donde

los resultados aproximados están muy cerca de la energía exacta. Con este método, la mayor diferencia disminuye hasta el valor de 1.01 MeV, encontrada en el  $^{51}\text{Ca}$ .

En el caso de utilizar estados generados con el cálculo PNVAP (PNVAP y los esquemas PGCM<sub>2</sub> y PGCM<sub>3</sub>), las diferencias no solo son menores, si no más suaves a lo largo de toda la cadena. En efecto, la aproximación PNVAP permite un trato más riguroso de las correlaciones de apareamiento, lo que se traduce en menores diferencias entre la descripción de núcleos pares e impares. Esto puede observarse en la reducción del zig-zag mencionado anteriormente.

Además, ahora vemos que la aproximación HFB es más pobre cuando las correlaciones de apareamiento son más débiles. Este es el caso de los núcleos impares, como consecuencia del bloqueo de niveles[72, 126, 127].

Por último, vemos que el esquema que mejor reproduce la cadena es el PGCM<sub>3</sub>, donde ahora la mayor diferencia se da en el  $^{51}\text{Ca}$ , con aproximadamente 0.24 MeV, lo que demuestra la gran capacidad de estas aproximaciones variacionales para acercarse al valor exacto de los estados fundamentales en espacios de valencia más grandes.

Analizamos ahora la capacidad de describir el espectro de bajas energías. Para ello, al igual que en el capítulo anterior se han calculado las energías de excitación de los estados más bajos con el modelo de capas y el método PGCM. Los resultados se muestran en las figuras 5.7 y 5.8 para los isótopos pares e impares respectivamente. Se puede afirmar que, en el cómputo global el grado de aproximación es de nuevo bueno, siendo capaz de reproducir, no solo la distribución de estados si no su valor numérico. Tanto es así, que en los límites de la capa, el método variacional alcanza la solución ISM incluso en los esquemas PGCM<sub>1</sub> y PGCM<sub>2</sub>. La concordancia numérica, no obstante, se reduce en la región intermedia, aunque los resultados mejoran con la inclusión de las fluctuaciones en el apareamiento  $nn$  con el cálculo PGCM<sub>3</sub>. En efecto, prueba explícita de ello es la sorprendente buena descripción del espectro de los isótopos impares.

Así, el efecto de la inclusión de las mencionadas fluctuaciones puede estudiarse comparando las aproximaciones basadas en estados HFB con las que emplean estados PNVAP. En primer lugar, para los núcleos pares, la aproximación PGCM<sub>1</sub> produce sistemáticamente mayores energías de excitación, las cuales se ven atenuadas cuando se analizan los resultados PGCM<sub>2</sub> y PGCM<sub>3</sub>. En segundo lugar, para



los núcleos impares, la aproximación PGCM<sub>2</sub> produce también en toda la cadena energías más altas, las cuales son reducidas cuando se explora simultáneamente la amplitud de apareamiento  $\delta_{nn}$ . De hecho, esta última aproximación nos genera un espectro prácticamente igual al exacto en estos isótopos.

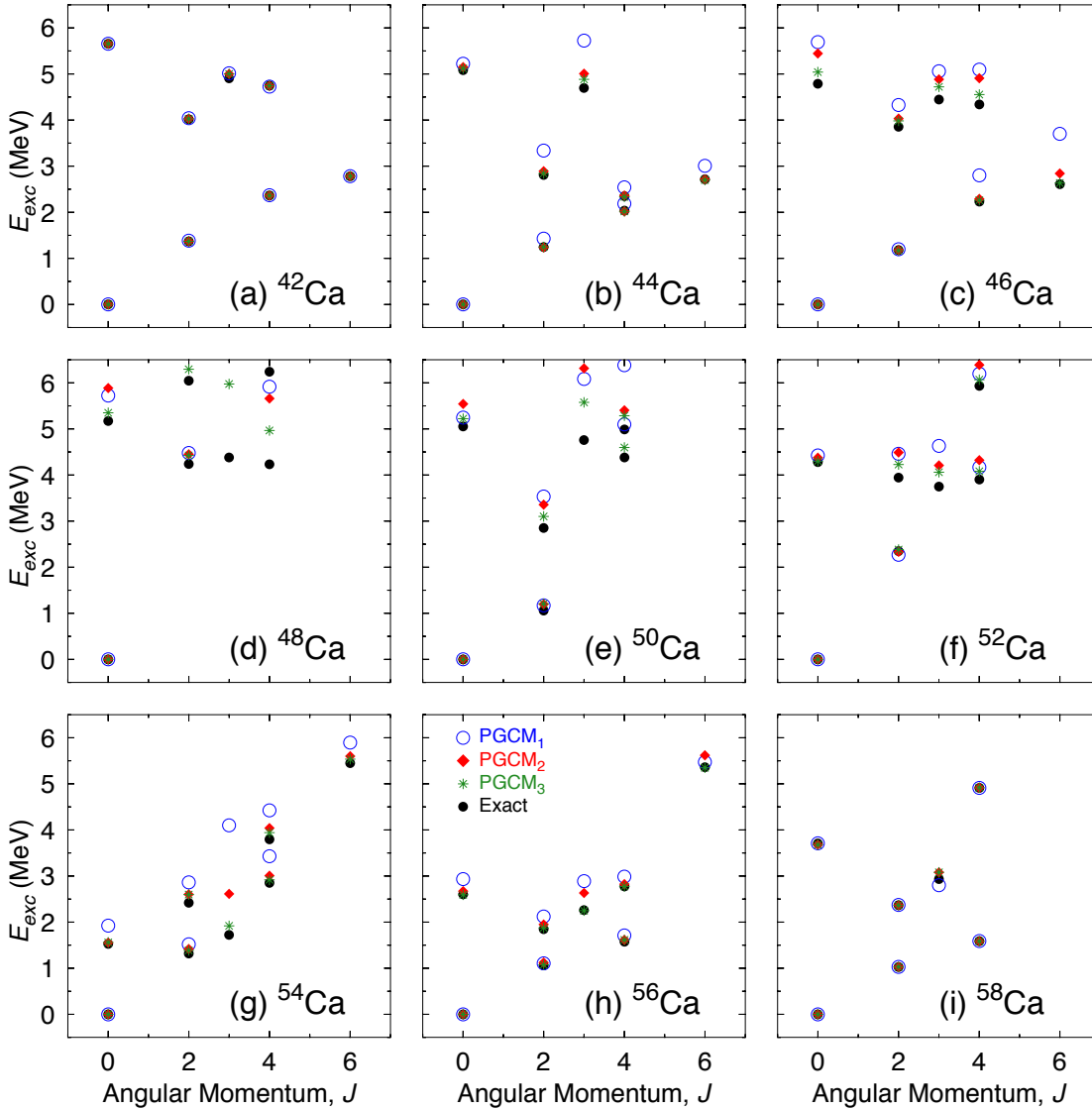


Figura 5.7: Energías de excitación en función del momento angular calculado con ISM y los diferentes esquemas PGCM para los isótopos pares del Ca.

Para los isótopos de masa par, se muestra en la Fig 5.9 las energías de excitación

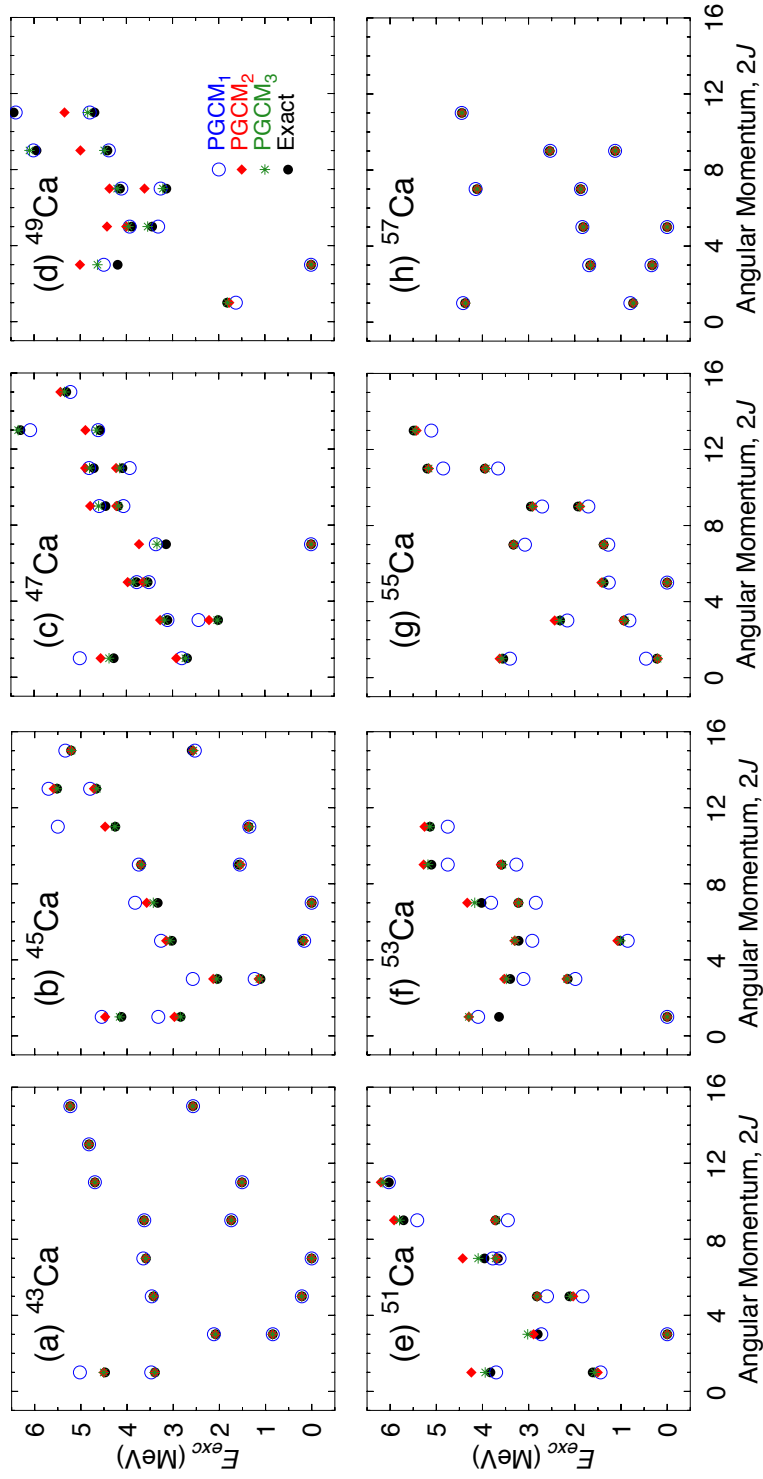


Figura 5.8: Energías de excitación en función del momento angular calculado con ISM y los diferentes esquemas PGC1 para los isótopos impares del Ca.

más bajas con  $J$  par para los distintos núcleos. De nuevo, se puede observar una buena reproducción de los resultados exactos. En concreto, estas aproximaciones son capaces de reproducir los principales efectos colectivos de dicha cadena. A modo de ejemplo encontramos los mismos picos de energía en  $N = 28$  y  $N = 32$  en los estados  $2_{1,2}^+$  asociados al cierre de las capas  $f_{7/2}$  y  $p_{3/2}$ ; el rapidísimo descenso del estado  $0_2^+$  para  $N = 34$  observable en las tres aproximaciones o la distribución de energía con forma de campana para los estados  $4_1^+$ .

Por el contrario, se puede ver que los esquemas PGCM<sub>1</sub> y PGCM<sub>2</sub> no describen correctamente los estados con  $0_2^+$  y  $4_1^+$  en el entorno del  $^{48}\text{Ca}$ . Estas discrepancias son corregidas parcialmente con la inclusión de las fluctuaciones de apareamiento del esquema PGCM<sub>3</sub>. Una vez más, esto es un indicador de que con los grados de libertad escogidos, no podemos acceder a las diferentes configuraciones de partícula independiente necesarias para poder describir correctamente estos estados. Teniendo en cuenta la ausencia de protones de valencia, una mejor descripción de esta cadena pasaría por incluir como grado de libertad la frecuencia rotacional o las excitaciones explícitas de varias cuasipartículas. A pesar de esto, la última de las aproximaciones está en buen acuerdo con la descripción exacta general de los estados excitados analizados.

### 5.2.2. Números de ocupación y dimensión del Hamiltoniano

Como información complementaria a los espectros de energías, analizamos los números de ocupación obtenidos con el último cálculo PGCM. En concreto, se han calculado para los núcleos de masa par y se han comparado con los obtenidos con el modelo de capas para los dos primeros estados excitados  $0^+$  y  $2^+$ . De la Fig. 5.10 se observa que las diferencias para ambos estados a lo largo de toda la cadena (par) son prácticamente despreciables. Sin embargo, se aprecian leves diferencias para los estados con  $\sigma = 2$  en la región de isótopos intermedia, esto es,  $^{46-52}\text{Ca}$ . Estas diferencias, por tanto, son consecuentes con la descripción de los espectros mostrada en el apartado anterior. Aún así, estas variaciones son de aproximadamente 0.1 partículas en prácticamente todos los casos.

De este modo, vemos la capacidad de este método para describir la estructura de partícula independiente de las funciones de onda nucleares explorando las coordena-

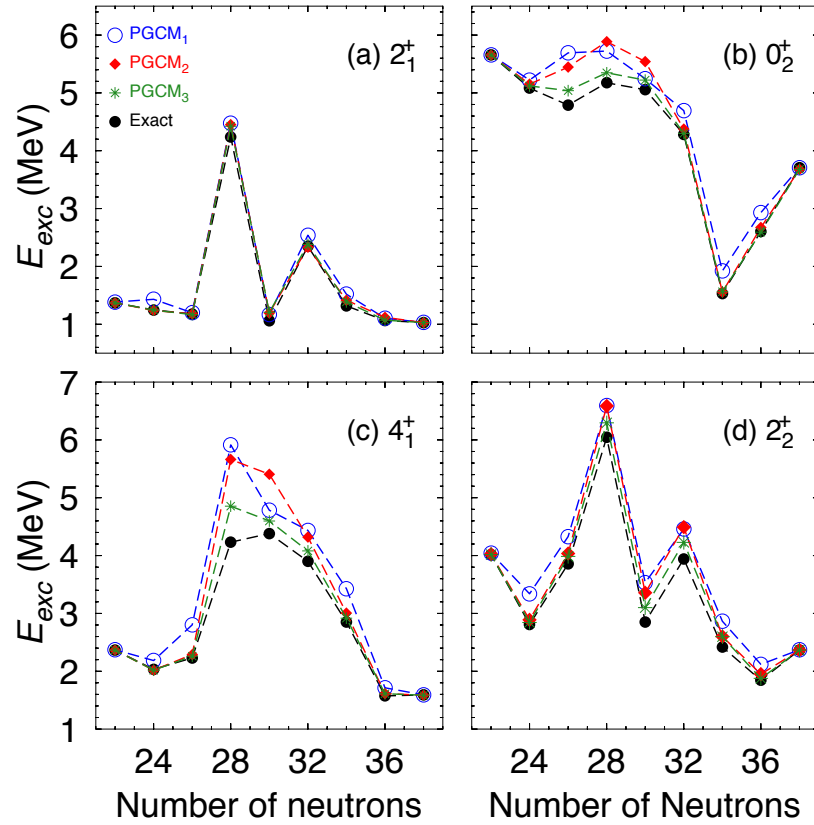


Figura 5.9: Energías de excitación para los isótopos pares del Ca calculados con el método ISM y los diferentes esquemas PGCM.

das escogidas.

Estos últimos resultados sugieren que, para los valores de  $J$  estudiados, los autoestados de menor energía del subespacio- $J$  de Hilbert de muchos cuerpos se pueden describir en muy buena aproximación por la mezcla variacional de unos pocos estados correlacionados. La función de ondas obtenida con el método PGCM no es más que una superposición de estados de cuasipartícula proyectados que describen de forma óptima el estado fundamental, lo que es equivalente a diagonalizar el Hamiltoniano en el subespacio generado por los estados proyectados  $\{P_{MK}^J P^N P^Z P^\pi |\phi(q)\rangle \forall qK\}$ . Sin embargo, el conjunto de estados proyectados presentan un cierto grado de dependencia lineal, lo que hace que la dimensión del subespacio sea más pequeño. En el Cuadro 5.3 se compara la dimensión exacta de la diagonalización usando determi-

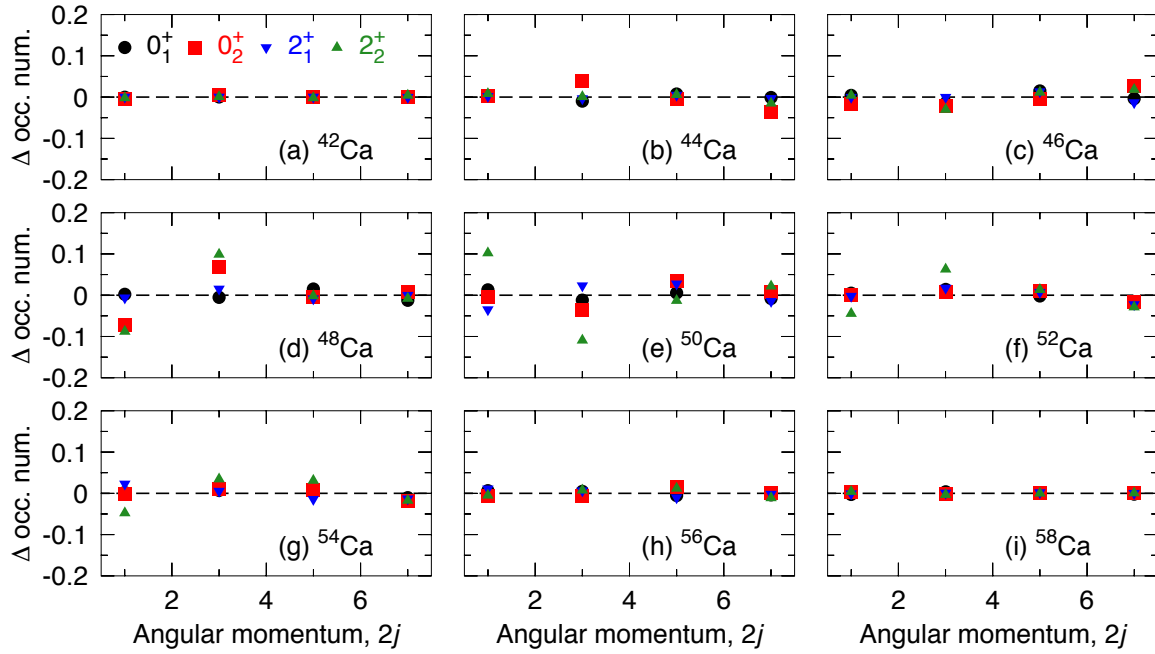


Figura 5.10: Diferencia entre los números de ocupación calculados con ISM y el esquema PGCM<sub>3</sub>. El eje horizontal representa el  $j$  de las cuatro posibles capas de neutrones la capa  $pf$ .

nantes de Slater con la dimensión de la base natural obtenida con el cálculo GCM para todos los isótopos de la cadena del Ca (la dimensión es simétrica para el mismo número de partículas que de huecos).

Por simplicidad, solo se muestran los resultados obtenidos con el esquema que presenta mejores resultados globalmente, esto es, el PGCM<sub>3</sub>. El número de estados intrínsecos  $|\phi(\beta_2, \gamma, \delta_{nn})\rangle$  está en torno a  $N_{GCM} = 120 - 150$  para los isótopos a mitad de espacio de valencia. Dado que se realiza la mezcla en el número cuántico  $K$ , el número real de estados mezclados viene dado, para cada momento angular,  $J$ , por  $N_{GCM} \times (2J + 1)$ . Así, se observa una gran reducción en dicho número cuando se extraen los estados de la base natural, debido como era de esperar por la redundancia que produce la dependencia lineal entre los distintos estados proyectados.

Sin embargo, es importante destacar que en los extremos de la capa  $^{42|58}\text{Ca}$  y  $^{45|57}\text{Ca}$ , las dimensiones de la base natural son igual –o prácticamente igual– que las de las bases construidas con los determinantes de Slater. Por tanto, en dichos casos,

$J$	$^{42}\text{Ca}$	$^{44}\text{Ca}$	$^{46}\text{Ca}$	$^{48}\text{Ca}$	$^{50}\text{Ca}$	$^{52}\text{Ca}$	$^{54}\text{Ca}$	$^{56}\text{Ca}$	$^{58}\text{Ca}$
0	4   4	28   13	137   15	347   15	468   21	347   23	137   23	28   17	4   4
2	8   8	94   29	512   35	1390   39	1935   46	1390   50	512   50	94   38	8   8
4	6   6	99   38	615   44	1755   57	2468   69	1755   71	615   71	99   30	6   6
6	2   2	59   28	462   34	1426   56	2051   60	1426   54	462   54	59   19	2   2
$J$	$^{43}\text{Ca}$	$^{45}\text{Ca}$	$^{47}\text{Ca}$	$^{49}\text{Ca}$	$^{51}\text{Ca}$	$^{53}\text{Ca}$	$^{55}\text{Ca}$	$^{57}\text{Ca}$	
1/2	12   10	107   31	415   34	790   36	790   34	415   27	107   31	12   12	
3/2	25   19	198   43	764   54	1484   41	1484   47	764   76	198   63	25   23	
5/2	28   21	253   50	1005   96	1965   94	1965   87	1005   87	253   59	28   26	
7/2	27   22	271   47	1121   48	2215   105	2215   114	1121   125	271   92	27   27	
9/2	23   22	252   85	1091   95	2214   147	2214   133	1091   139	252   112	23   23	
11/2	16   16	211   68	974   89	2017   136	2017   122	974   142	211   99	16   16	
13/2	8   8	153   65	783   131	1669   115	1669   95	783   111	153   75	8   8	
15/2	5   5	105   58	577   111	1284   91	1284   73	577   80	105   52	5   5	

Cuadro 5.3: Dimensión de las matrices del Hamiltoniano en el cálculo ISM (valores de la izquierda) y PGCM<sub>3</sub> (valores de la derecha) para los núcleos pares (fila superior) e impares (fila inferior) de la cadena isotópica del Ca en la capa  $pf$ .

los cálculos ISM y PGCM son equivalentes.

También es necesario notar que, para los isótopos a mitad de capa, aunque el número de estados de muchos cuerpos en la base natural es dos órdenes de magnitud inferior a la base del modelo de capas, los resultados recopilados en esta sección siguen siendo verdaderamente buenos. Esto, como ya se ha comentado en capítulos anteriores, es un indicio de que para construir una buena función de ondas que describa la estructura del núcleo, parece que es más relevante encontrar los grados de libertad que den la información física adecuada que el número de estados que podamos utilizar.



---

# Capítulo 6

## Correlaciones de apareamiento como coordenada generadora

### 6.1. Introducción

El fenómeno de apareamiento entre nucleones en el medio nuclear es bien conocido desde hace tiempo y multitud de evidencias experimentales sustentan su existencia[16]. Además, debido a la parte de corto alcance (atractiva) de la interacción nucleón-nucleón, es de esperar que las partículas tiendan a acoplarse a un estado de momento angular nulo,  $L = 0$ , ya que el solape espacial de las funciones de onda de ambos nucleones es máxima cuando estos presentan el mismo  $|m_l|$ .

Si bien lo anterior es cierto, dada la antisimetría de la función de onda de dos nucleones y los números cuánticos de espín e isospín, es posible que el acoplamiento pueda darse en diferentes canales. El apareamiento  $pp$  o  $nn$  solo puede darse cuando sus espines son antiparalelos, de tal modo que se obtienen pares del tipo  $T_p = 1, J_p = 0$ , donde la tercera componente de isospín total indicaría si es un par  $pp$  ( $M_{T_p} = -1$ ) o  $nn$  ( $M_{T_p} = +1$ ). Este canal de apareamiento es el más relevante en los casos  $N > Z$  y es el que es capaz de dar una explicación satisfactoria a hechos experimentales tales como que todos los estados fundamentales de los núcleos par-par son  $0^+$  o que las energías de separación de un solo neutrón son menores (en valor absoluto) en núcleos par-impar que en los par-par, entre otros[128].

Sin embargo, cuando los niveles de Fermi de protones y neutrones son cercanos



entre sí, esto es  $N \approx Z$ , se espera que los pares  $pn$  adquieran un mayor peso en el sistema. Estos pares pueden darse en cualquiera de los canales  $M_{T_p} = 0$  isoescalar o isovectorial, por lo que surge de forma natural preguntarse cuál de ellos es más favorable y bajo qué condiciones. Y aquí es dónde comienza la controversia.

En el artículo de revisión de 2014 de Frauendorf y Macchiavelli[129] se exponen, tanto a nivel teórico como experimental, una gran cantidad de trabajos presentes en la literatura en los que se explora la competición entre los dos tipos de correlaciones. Dos de las conclusiones que estos dos autores resumen en el último capítulo de la publicación son las siguientes:

1. Para los casos  $N = Z$  el apareamiento isovectorial alcanza la misma magnitud que los canales  $pp$  y  $nn$ . Esta conclusión reside, entre otras evidencias, en la aparición de bandas isorotacionales de tipo  $T(T + 1)$  o de vibraciones  $T_p = 1, J_p = 0$  en los núcleos pares cercanos a los doblemente mágicos  $^{40}\text{Ca}$  y  $^{56}\text{Ni}$ .
2. No se encuentran evidencias para la existencia y relevancia del modo colectivo  $T_p = 0$ . No obstante, se entiende que este canal no es más que una excitación de dos cuasipartículas asociado al vacío de pares isovectoriales. Esta idea está apoyada en que, entre otros motivos, los estados  $1^+$  de los núcleos impar-impar con  $N = Z$  se suelen encontrar con una energía de excitación en torno a 0.5 – 1 MeV, o bien que las transiciones Gamow-Teller no se ven potenciadas en núcleos  $N = Z$ .

Por tanto, todo parece apuntar a que lo habitual, en el medio nuclear, sea la formación de pares  $pp$ ,  $nn$  y, a cierta igualdad de número de protones y neutrones, que surjan los pares  $pn$   $T_p = 1, J_p = 0$ . En cuanto al canal de apareamiento isoescalar, en la actualidad existen algunas discrepancias, dado que existen situaciones en las que este grado de libertad parece ser relevante.

En primer lugar, encontramos el problema de la energía de Wigner. Es bien conocido el término dependiente del isoespín en la fórmula semiempírica de masas, el cual es necesario para poder describir correctamente los picos de energía en los núcleos  $N = Z$  en las cadenas isobáricas. Sin embargo, su origen no está del todo claro, por lo que un candidato a poder explicar este término es el apareamiento  $pn$ . Este es el comienzo de uno de los múltiples estudios que intentaron responder a

esta cuestión[130]. En dicho artículo, se extraen los hamiltonianos de apareamiento isoescalar e isovectorial de la interacción KB3 para poder estudiar cómo contribuye cada uno al estado fundamental de las cadenas isobáricas  $A = 46, 48, 50$ . Podemos ver en la Fig. 6.1 una menor influencia del término isoescalar, no solo en el estado fundamental, sino en el resto de estados excitados. Aún así, se puede ver que la contribución del apareamiento  $T = 0$  es considerable en los casos  $N \approx Z$ .

Si bien el artículo concluye que no se puede atribuir el origen de la energía de Wigner a estos canales de apareamiento, los resultados mostrados en la figura anterior son alentadores para creer que estas correlaciones son más relevantes de lo que se espera.

Otro escenario que deja la puerta abierta al apareamiento isoescalar es la desintegración  $\beta$  doble sin neutrinos. Debido a la interacción de apareamiento –como ya se ha mencionado– la energía de ligadura de los núcleos par-par de una cadena isobárica presentan una parábola más profunda que los impar-impar y, por tanto, puede darse que la desintegración desde un núcleo par-par hacia el siguiente par-par más estable no pueda darse a través del impar-impar intermedio, pues puede estar energéticamente prohibido (ver Fig. 6.2 para el caso de la cadena  $A = 76$ ). De este modo, es posible que la desintegración  $\beta$  se produzca simultáneamente para dos nucleones. Así, está teorizado que esta desintegración doble puede presentarse en dos modos distintos: una en la que se emiten dos neutrinos y otra en la que no hay emisión de estos. La primera se ha detectado experimentalmente, mientras que la segunda no se ha medido a día de hoy. De ser probada su existencia, tendríamos que entender los neutrinos como partículas de Majorana[131], por lo que podrían aniquilarse entre sí.

Esta desintegración también es de gran interés en el campo de la física de partículas. En efecto, teniendo en cuenta la expresión (3.151), el desarrollo teórico y experimental permitirá afinar el valor de la masa de los neutrinos según se mejore el valor del periodo de semidesintegración, esperable del orden de  $10^{27}$  años[113, 133]. Además, será necesaria la obtención del elemento de matriz nuclear, por lo que los cálculos de estructura nuclear también se ven necesarios para poder abordar correctamente el problema de la jerarquía de masas del neutrino[134]. Hasta la fecha, el elemento de matriz nuclear ha sido estudiado con diferentes aproximaciones, como el ISM[135–139], QRPA[140–142] o GCM[110, 143–147], dando resultados que difieren

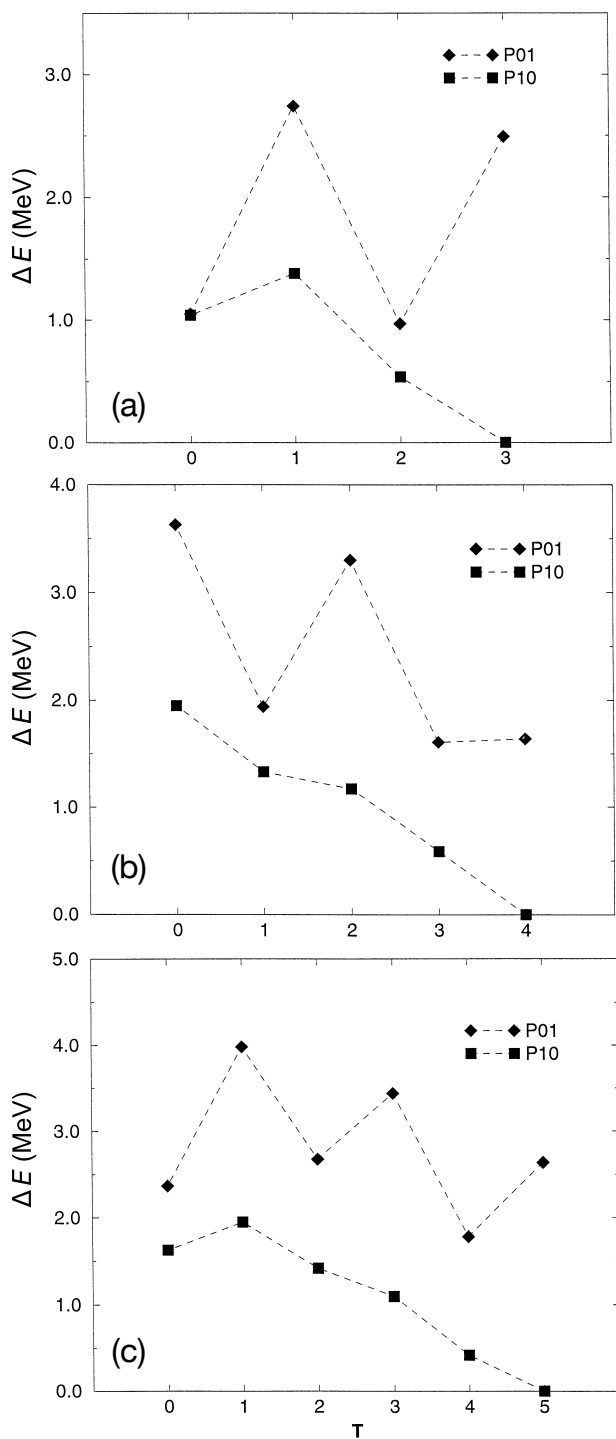


Figura 6.1: Diferencia de energías entre el hamiltoniano completo KB3 y los hamiltonianos de apareamiento isoescalar (P10) e isovectorial (P01) para las cadenas (a)  $A = 46$ , (b)  $A = 48$  y (c)  $A = 50$ . La figura está adaptada de la referencia [130].

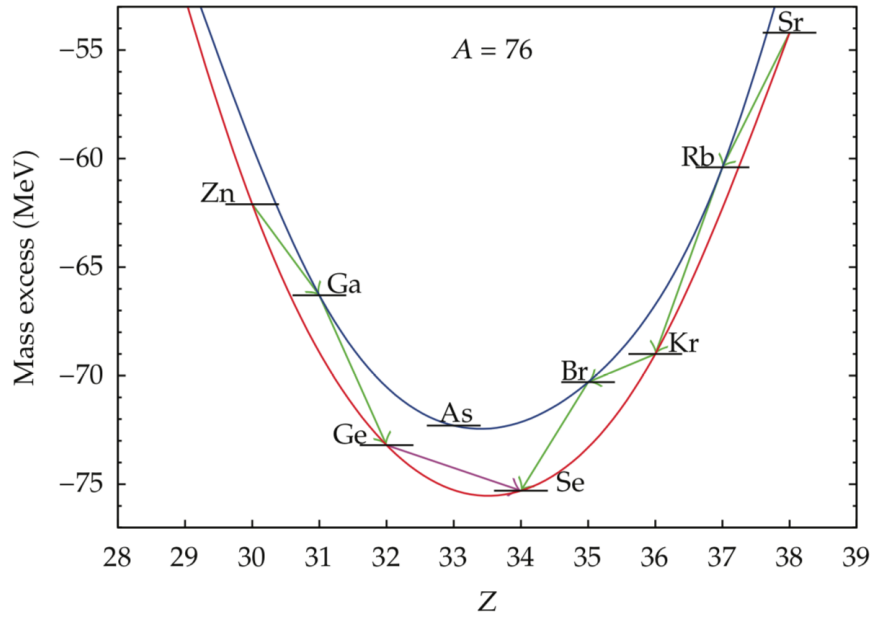


Figura 6.2: Parábola de masas de núcleos par-par e impar-impar de la cadena isobárica  $A = 76$ . Las líneas verdes indican las transiciones  $\beta$ . La línea rosa indica la desintegración  $\beta\beta$ . Extraído de [132].

entre sí en un factor de hasta tres.

En relación con estos últimos resultados, se ha observado que, al utilizar un hamiltoniano de la forma (6.1), la inclusión de las correlaciones de apeamiento isoescalar disminuye significativamente el elemento de matriz de Gamow-Teller[148], si bien este análisis solo se ha centrado en la transición  $^{76}\text{Ge} \rightarrow ^{76}\text{Se}$  y en este canal únicamente. Resultados no tan llamativos se han encontrado cuando se emplean métodos *ab initio*, donde la formación de pares isoescalares solo hace variar el elemento de matriz nuclear en un 17 %[149].

De este modo, para entender estas diferencias encontradas en las distintas aproximaciones se ve necesario explorar cuáles son los grados de libertad relevantes, tanto colectivos como no colectivos. En el artículo de Menéndez *et al.*[144] se procedió del siguiente modo: tomando como referencia los resultados obtenidos con la interacción realista efectiva KB3G[150], se construyó un hamiltoniano de tipo

$$\begin{aligned}
H_{coll} = H_M + g^{T=1} \sum_{n=-1}^1 S_n^\dagger S_n + g^{T=0} \sum_{m=-1}^1 P_m^\dagger P_m + g_{ph} \sum_{m,n=-1}^1 : F_{mn}^\dagger F_{mn} : \\
+ \chi \sum_{\mu=-2}^2 : Q_\mu^\dagger Q_\mu : \quad (6.1)
\end{aligned}$$

que corresponden a los términos de la interacción monopolar, apareamiento isovectorial e isoescalar, acoplamiento espín-isoespín y cuadrupolo-cuadrupolo respectivamente. Así, para que la comparación fuera lo más fidedigna posible, se ajustaron las diferentes constantes para ajustarse a distintos resultados obtenidos con la interacción efectiva. Una vez realizado el ajuste, se fueron eliminando diferentes términos del hamiltoniano colectivo fijando a cero las constantes de cada término, lo que permitió analizar la dependencia del elemento de matriz nuclear en las diferentes partes asociadas a los grados de libertad colectivos y no colectivos. En la Fig. 6.3 se puede observar que la eliminación del término isoescalar hace que los elementos de matriz de la desintegración aumenten en un factor superior a dos.

Con todo lo anterior, en este capítulo se explorarán los distintos canales  $\delta_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p}$  considerándolos coordenadas generadoras del método PGCM, con el objetivo de analizar más exhaustivamente el papel de las diferentes correlaciones de apareamiento en la descripción de la estructura y desintegraciones  $\beta$ , tanto simple como doble sin neutrinos. Además, se hará cierto énfasis en la distinción entre las correlaciones de apareamiento isoescalar e isovectorial.

## 6.2. Exploración explícita de las correlaciones de apareamiento

En los capítulos anteriores se ha podido comprobar que los vacíos de cuasipartícula que mezclan estados de protones y neutrones son una mejor aproximación variacional frente a aquellos que preservan la estructura de bloques separada. Además, una de las grandes ventajas de este tipo de funciones de onda residúa en la capacidad de describir núcleos de cualquier tipo, esto es, par-par, par-impar (impar-par)

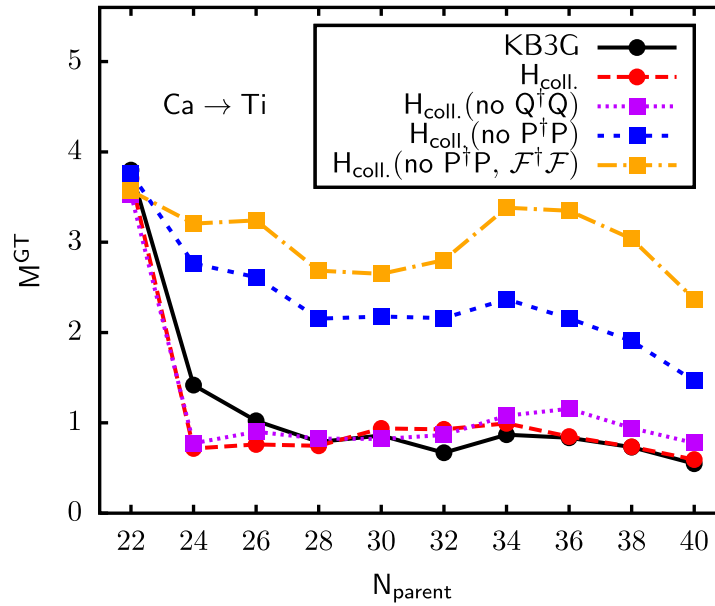


Figura 6.3: Elementos de matriz de Gamow-Teller de la desintegración  $0\nu\beta\beta$  en función del número de neutrones del núcleo inicial eliminando distintos términos del hamiltoniano colectivo y comparando con la interacción completa KB3G. Extraído de [144].

o impar-impar. Junto con lo anterior, los cálculos en la cadena isotópica del Ca han mostrado que incluir las correlaciones de apareamiento ( $nn$  en ese caso) como coordenada generadora en el esquema PGCM nos permitirían aproximarnos más aún a la función de onda de muchos cuerpos exacta.

Sin embargo, a la luz del breve estudio sobre el  $^{24}\text{Ne}$ , vimos que tomar cualquiera de las amplitudes de apareamiento en el generador producía resultados muy similares entre sí (ver Fig. 4.12). En efecto, como ya se ha mencionado, la bondad del método variacional en espacios de valencia de tamaño reducido estaría altamente relacionada con la obtención del mayor número posible de estados intrínsecos linealmente independientes, independientemente de los grados de libertad que se exploren.

Aún con esto, el análisis de las funciones de onda colectivas, muestra que lo anterior no es del todo cierto. Baste considerar el caso del  $^{48}\text{Ca}$  (ver Fig. 5.4) como ejemplo: mientras que el estado fundamental presentaba una superficie muy plana en el plano  $(\beta_2, \gamma)$ , los picos abruptos encontrados en el resto de estados excitados,

indicarían que hay ciertas configuraciones que no podrían ser descritas sin haber explorado explícitamente esos grados de libertad.

### 6.2.1. Formación de pares $pn$ en las capas $sd$ y $pf$

Centrando la atención en las correlaciones de apareamiento protón-neutrón, una primera forma de conocer la posible relevancia en la descripción de la estructura nuclear sería evaluar la energía de apareamiento  $pn$ , dada por

$$E_{pair}^{pn} = -\frac{1}{2}\text{Tr} \left( \Delta_{a_p b_n} \kappa_{a_p b_n}^* + \Delta_{a_n b_p} \kappa_{a_n b_p}^* \right) \quad (6.2)$$

en los estados intrínsecos que describen los diferentes núcleos en un determinado espacio de valencia. Para ello, se han calculado todos los posibles núcleos en el espacio de valencia dado por la capa  $sd$ , con la interacción USD, y la  $pf$ , con la interacción KB3G con el método PNVAP sin ligaduras. Esto permite una mayor inclusión de correlaciones de apareamiento y, en el caso de sistemas con número impar de partículas (bien protones, neutrones o ambos), evita la dependencia en la estructura inicial de bloqueo.

De la Fig. 6.4, como se podría haber esperado, vemos que aquellos núcleos que presentan una mayor energía de apareamiento  $pn$  son precisamente los que se encuentran cercanos a los casos  $N = Z$ . Fuera de esta línea, dado que la interacción preserva isoespín, se observa una clara simetría bajo el intercambio entre  $N$  y  $Z$ . Además, aunque en la capa  $pf$  se observan muchos más núcleos con energías de apareamiento cercanas a los 2 MeV (en valor absoluto), en la capa  $sd$  también encontramos resultados similares precisamente en los núcleos que tienen abiertas las dos capas de mayor degeneración, esto es, la subcapa  $0d_{5/2}$  y  $0d_{3/2}$ . Estos resultados también se aplican a núcleos impares, como es el caso del  $^{21}\text{Ne}$  ( $Z_v = 2$ ,  $N_v = 3$ ) o del  $^{23}\text{Mg}$  ( $Z_v = 4$ ,  $N_v = 3$ ). Así, vemos que este tipo de correlaciones no solo dependería del número de protones y neutrones, sino también del tamaño de las capas abiertas asociadas a los distintos núcleos.

Dado que la energía de apareamiento  $pn$  no indica el canal de acoplamiento  $JT$  de los pares formados en los distintos núcleos, para conocer la relevancia de las correlaciones protón-neutrón isovectorial e isoescalar se han analizado las amplitudes

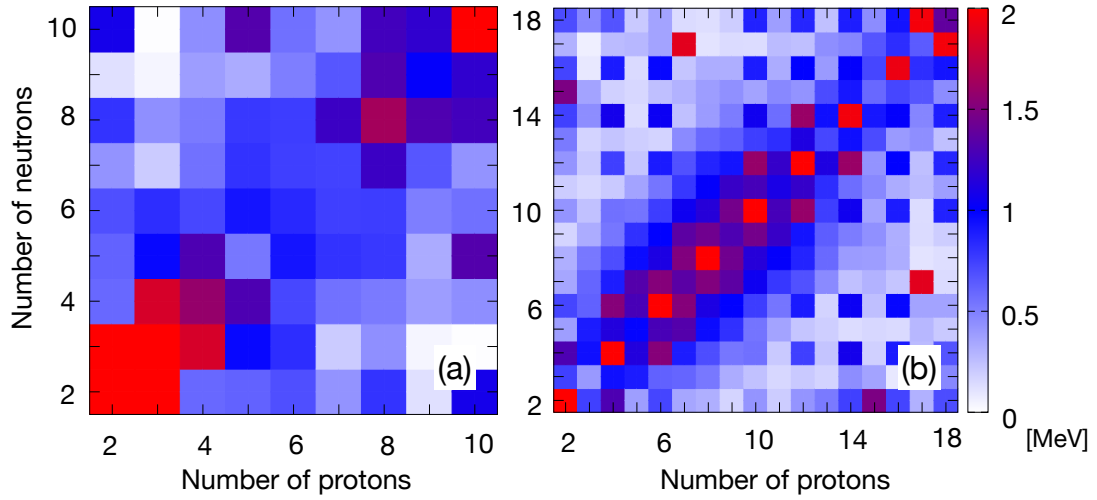


Figura 6.4: Energía de apareamiento  $pn$  (en valor absoluto) de los estados intrínsecos PNVAP para los núcleos par-par, par-impar, impar-par e impar-impar en la capa (a)  $sd$  y (b)  $pf$  obtenidos con las interacciones USD y KB3G, respectivamente.

de apareamiento  $\delta_{00}^{01}$  y  $\delta_{00}^{10}$ , respectivamente a lo largo de toda la capa  $sd$  y  $pf$ . Los resultados se muestran en la Fig. 6.5.

En primer lugar, vemos que las amplitudes de apareamiento máximas se encuentran en el entorno cercano a  $N = Z$ , teniendo en la capa  $pf$  valores algo más del doble que en la capa  $sd$ . Así, mientras que las energías de apareamiento tomaban resultados similares en ambos espacios de valencia, las amplitudes de apareamiento  $\delta$  aumentan según se introduce un mayor número de partículas activas en el sistema. En segundo lugar, en la capa de mayor tamaño, los pares isoescales tienen un comportamiento ligeramente distinto, encontrando mayor diversidad de resultados: para los casos  $N \approx Z$ , se han encontrado valores cercanos al máximo (en torno a 2), y también aparecen vacíos de cuasipartícula sin pares acoplados en este canal, la mayoría sistemas impar-impar, o en la diagonal  $N = Z$ , a excepción de  $N = Z = 4, 16$ . Aún con esto, en ambas capas se encuentran estados intrínsecos con pares isoescales en prácticamente toda la región de estudio.

A la luz de estos resultados, vemos que la contribución de los pares isovectoriales a las correlaciones de apareamiento es notablemente superior en núcleos con un número similar de protones y neutrones, si bien el canal isoescalar no puede conside-



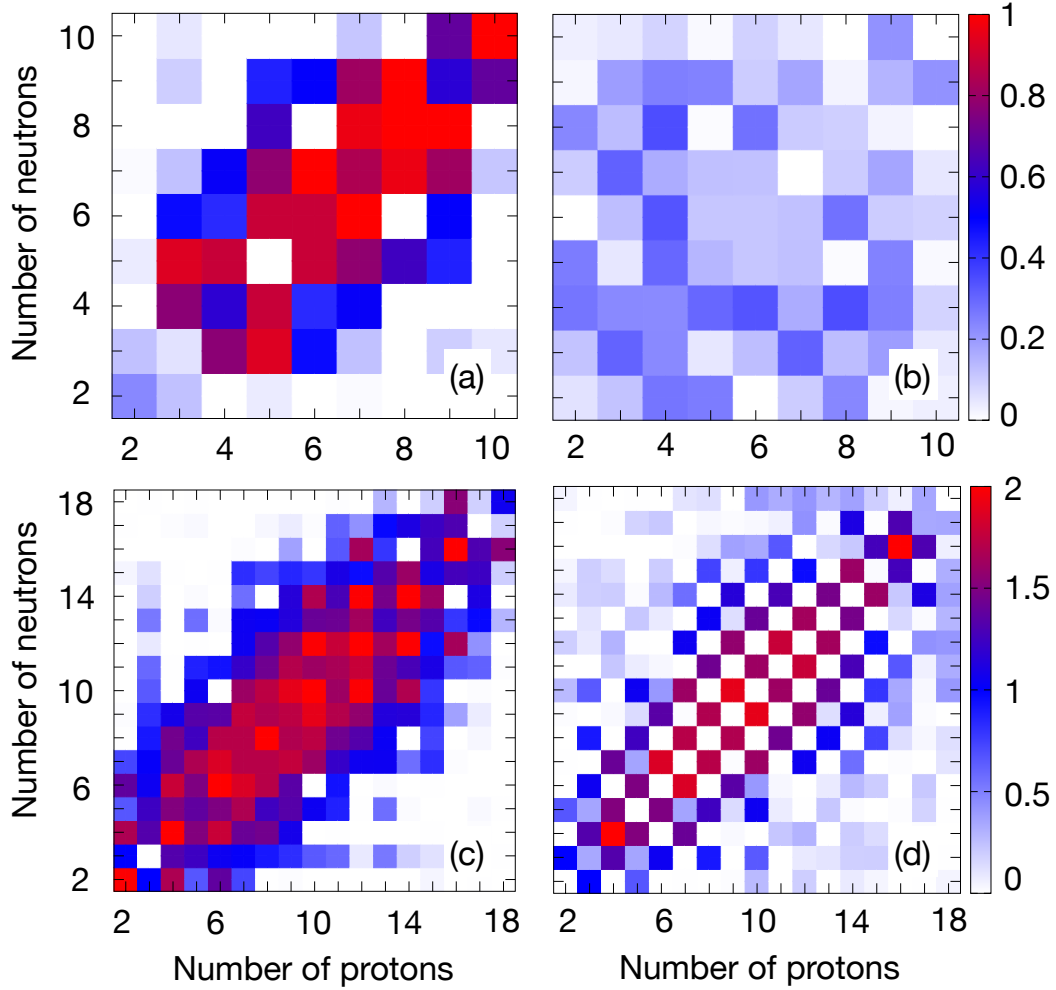


Figura 6.5: Amplitudes de apareamiento  $\delta_{00}^{01}$  (columna izquierda) y  $\delta_{00}^{10}$  (columna derecha) de los estados intrínsecos PNVAP para los núcleos par-par, par-impar, impar-par e impar-impar en la capa (a)-(b) *sd* y (c)-(d) *pf* obtenidos con las interacciones USD y KB3G, respectivamente.

rarse despreciable en la gran mayoría de casos. Por último, mientras que la formación de pares *pp* o *nn* se conoce que es atenuada por el bloqueo en el caso de los núcleos par-impar (impar-par)[151, 152], en el caso de los pares *pn* no se ha encontrado ese comportamiento. En efecto, las energías de apareamiento *pn* son similares independientemente de la paridad del número de partículas, si bien la principal diferencia se ha encontrado en la amplitud de apareamiento isoescalar en la capa *pf*, donde los

núcleos par-par presentan un menor contenido de este tipo de pares.

### 6.2.2. Variación explícita del apareamiento mediante ligaduras

Con el objetivo de analizar el efecto que produce en los estados intrínsecos la formación de pares de partículas, en este apartado se explorará explícitamente cada una de las correlaciones de apareamiento mediante la imposición de ligaduras en cada una de las amplitudes  $\delta_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p}$  asociadas a los diferentes canales de acoplamiento<sup>1</sup>. Además, para poder controlar mejor la inclusión de estas correlaciones se utilizará la minimización HFB y se ha fijado el parámetro de deformación  $\beta_2$  a cero<sup>2</sup>. Como núcleo de prueba se ha escogido el  $^{30}\text{Mg}$ , que presenta las dos subcapas de mayor tamaño abiertas tanto en protones como en neutrones, esto es,  $Z_v = 4$  y  $N_v = 10$ .

Aunque en capítulos anteriores ya se ha demostrado que aumentar la amplitud  $\delta$  implicaba incrementar las correlaciones de apareamiento asociadas (ver Fig. 5.2 para el caso de las correlaciones  $nn$ ), aquí se expondrán otros aspectos que se han considerado relevantes para entender la bondad de estos grados de libertad al tomarlos como coordenadas generadoras del cálculo PGCM completo. Esto es, cómo afecta el contenido de pares de un tipo a la energía total, al conjunto de energías de apareamiento y a la configuración monoparticular de la función de onda intrínseca.

Para simplificar la notación, hablaremos de  $\delta_{pp}$  en el caso  $M_{T_p} = -1$ ;  $\delta_{nn}$  para  $M_{T_p} = 1$ ;  $\delta_{pn}^1$  para el canal isovectorial con  $M_{T_p} = 0$  y  $\delta_{pn}^0$  para el isoescalar con  $M_{J_p} = 0$ .

#### Canales isovectoriales $pp$ y $nn$

Comenzando con el apareamiento isovectorial  $pp$  y  $nn$ , se han utilizado funciones de onda semilla que no permiten la mezcla  $pn$  y únicamente se imponen ligaduras

<sup>1</sup>Por simplicidad, se obvian los canales  $J_p = 1; M_{J_p} = \pm 1$  dado que –como se ha podido comprobar– están estrechamente relacionados con la orientación del sistema de referencia (ver Fig. 4.2), por lo que se han fijado a cero estos operadores.

<sup>2</sup>Como se ha podido comprobar en cálculos previos, variar la deformación cuadrupolar implica implícitamente variar el contenido de pares. Así, fijando los parámetros de deformación a un cierto valor, podemos atribuir el cambio en las correlaciones de apareamiento únicamente a la variación en  $\delta$ .

en los operadores  $\delta_{pp}$  o  $\delta_{nn}$ , dejando libre el canal que no se constriñe. Los resultados para la energía total y de apareamiento se muestran en la Fig. 6.6.

En primer lugar, destacamos el intervalo posible de valores  $\delta_{pp/nn}$  en los que el cálculo HFB converge. En efecto, teniendo en cuenta que estamos tratando con cuatro protones y diez neutrones de valencia, llama la atención que las amplitudes máximas en ambos canales tomen valores tan cercanos entre sí (2.75 para protones y 2.22 para neutrones). Además, el rango de valores permitido para neutrones es ligeramente inferior, lo que confirma nuevamente que las correlaciones de apareamiento no solo dependen del número de partículas si no de la degeneración de las subcapas abiertas donde interactúan.

En segundo lugar, vemos que la variación en cualquiera de los canales  $\delta$  no afecta significativamente al resto. Por un lado, la estructura de bloques separados en protones y neutrones se preserva en todo momento; por otro, las energías de apareamiento  $nn$  ( $pp$ ) presentan variaciones muy leves al variar  $\delta_{pp}$  ( $\delta_{nn}$ ). En ambos casos, además, la energía de apareamiento asociada al canal que varía aumenta (en valor absoluto) con un comportamiento cualitativo similar. Si bien, en el panel (a) vemos que para  $\delta_{pp} = 0$ , el estado intrínseco aún presenta cierta energía de apareamiento  $pp$ . Este hecho, de nuevo, puede atribuirse a presentar la subcapa de mayor tamaño ( $0d_{5/2}$ ) abierta.

Por último, vemos que las energías totales también varían suavemente al aumentar el contenido de pares  $pp$  y  $nn$ , alcanzando el mismo valor mínimo en ambas curvas para un valor de -125.47 MeV aproximadamente. Además, para ese estado, las energías de apareamiento toman (en ambos cálculos) los valores  $E_{pair}^{pp} = -3.15$  MeV y  $E_{pair}^{nn} = -2.26$  MeV, resultados que se obtienen autoconsistentemente cuando se realiza el cálculo con la única ligadura  $\beta_2 = 0$ .

Si se analizan los número de ocupación de las diferentes subcapas que componen nuestro espacio de valencia, dado por la capa  $sd$ , podemos conocer cómo afecta el incremento el incremento del número de pares isovectoriales en la configuración de las funciones de onda intrínsecas. En la Fig. 6.7 se muestran las distintas ocupaciones de las subcapas de protones y neutrones en función de las amplitudes  $\delta_{pp}$  y  $\delta_{nn}$ . Dado que solo se varía las correlaciones de apareamiento en una única especie de nucleones, vemos que los números de ocupación solo cambian en las subcapas del propio tipo

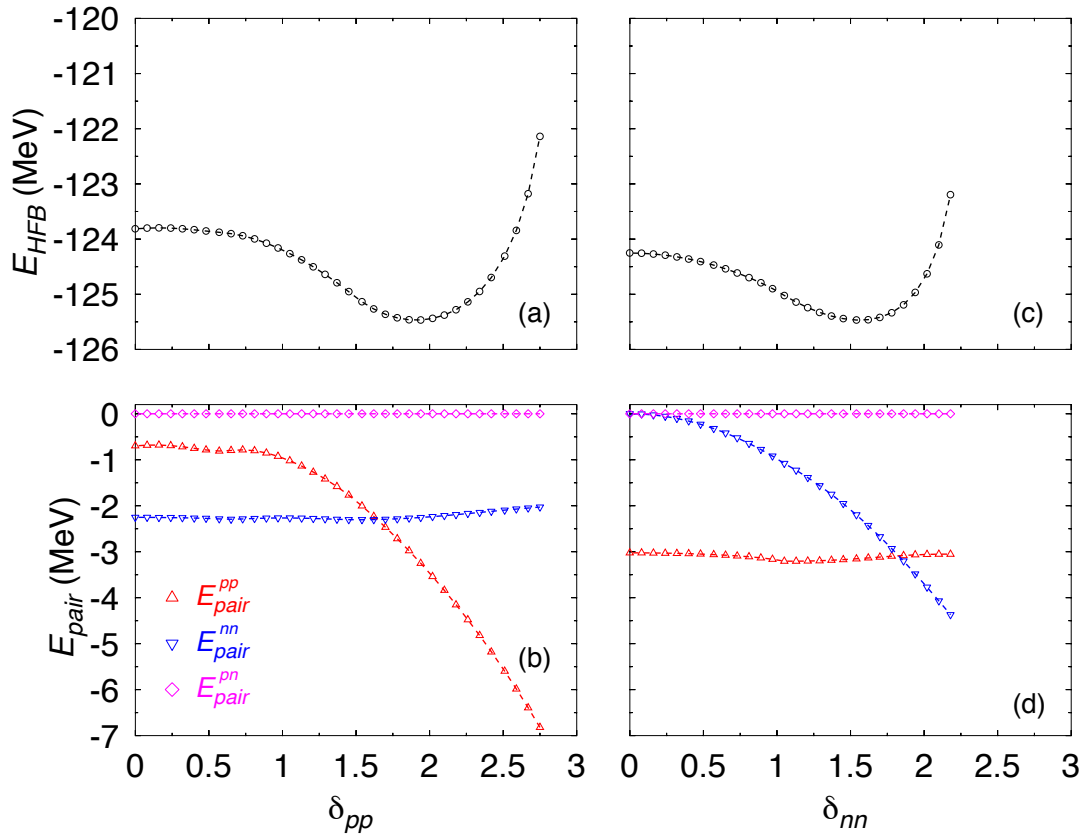


Figura 6.6: Energía HFB (paneles superiores) y de apareamiento (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pp}$  y (c)-(d)  $\delta_{nn}$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD.

de partículas. Así, a modo de ejemplo, al aumentar  $\delta_{pp}$ , vemos que en todo momento tenemos seis neutrones en la subcapa  $0d_{5/2}$ , y (casi) dos neutrones tanto en la  $1s_{1/2}$  como en la  $0d_{3/2}$ .

Además, en ambos casos, vemos que las ocupaciones se mantienen prácticamente constantes hasta alcanzar un cierto valor en  $\delta$  (1.75 en protones y 1.25 en neutrones, aproximadamente), momento a partir del cuál cambia la distribución de los nucleones. Por ejemplo, se puede observar en el panel (a) que, para un alto contenido de correlaciones de apareamiento  $pp$ , se promocionan dos protones de la subcapa  $0d_{5/2}$  a la  $1s_{1/2}$  y  $0d_{3/2}$ , cada uno. Por tanto, la inclusión de un mayor grado de apareamiento puede entenderse –paradójicamente– como un modo alternativo de romper pares de partículas sin necesidad de trabajar en el formalismo de antigüedad (*senio-*

ality)[75, 153].

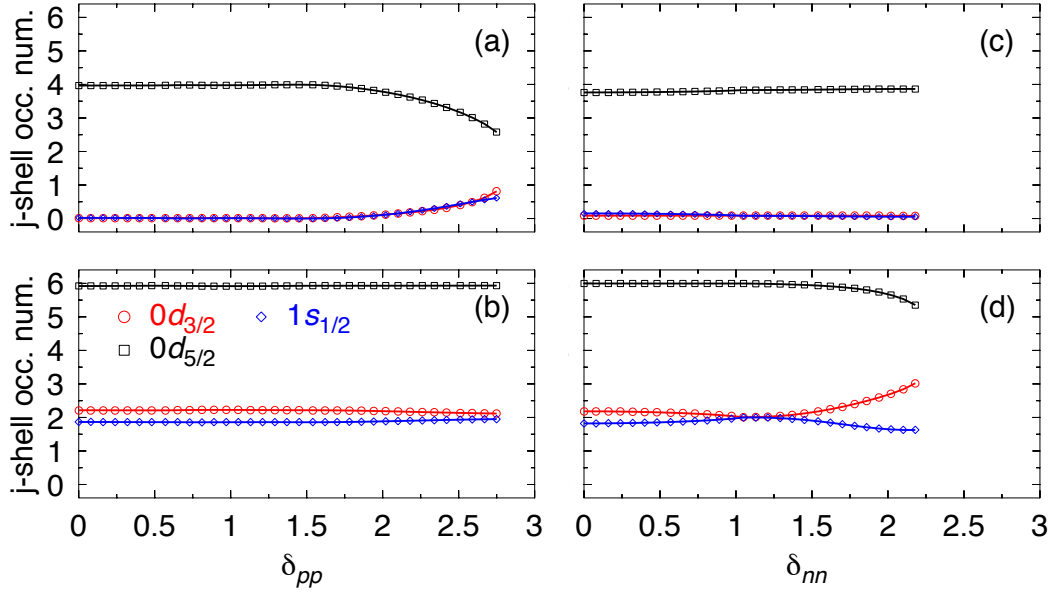


Figura 6.7: Ocupaciones de las subcapas  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$  y  $0d_{3/2}$  de protones (paneles superiores) y neutrones (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pp}$  y (c)-(d)  $\delta_{nn}$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD.

### Canales $pn$ isovectorial e isoescalar

Para la exploración de estas correlaciones de apareamiento, se ha tomado como semilla igualmente una función de onda con estructura de bloques separados en protones y neutrones<sup>3</sup>, y se ha dejado que las energías de apareamiento  $pp$  y  $nn$  varíen libremente. Además, para poder distinguir bien entre ambos canales, al variar uno de estos, el otro se ha fijado a cero mediante una ligadura. Los resultados obtenidos se pueden ver en la Fig. 6.8.

En primer lugar, en ambos casos –isovectorial e isoescalar– encontramos dos ramas soluciones diferentes, según el cálculo converge en estados con y sin apareamiento  $pp/nn$ . Referido a las soluciones con todos los canales activos, según se incrementa la

<sup>3</sup>En cuanto los operadores  $\delta_{pn}$  se fijan distintos de cero, esta estructura se rompe. Esta forma de obtención de estados intrínsecos, sin embargo, no es posible con el cálculo PNVAP, donde surgen problemas numéricos debidos a la proyección.

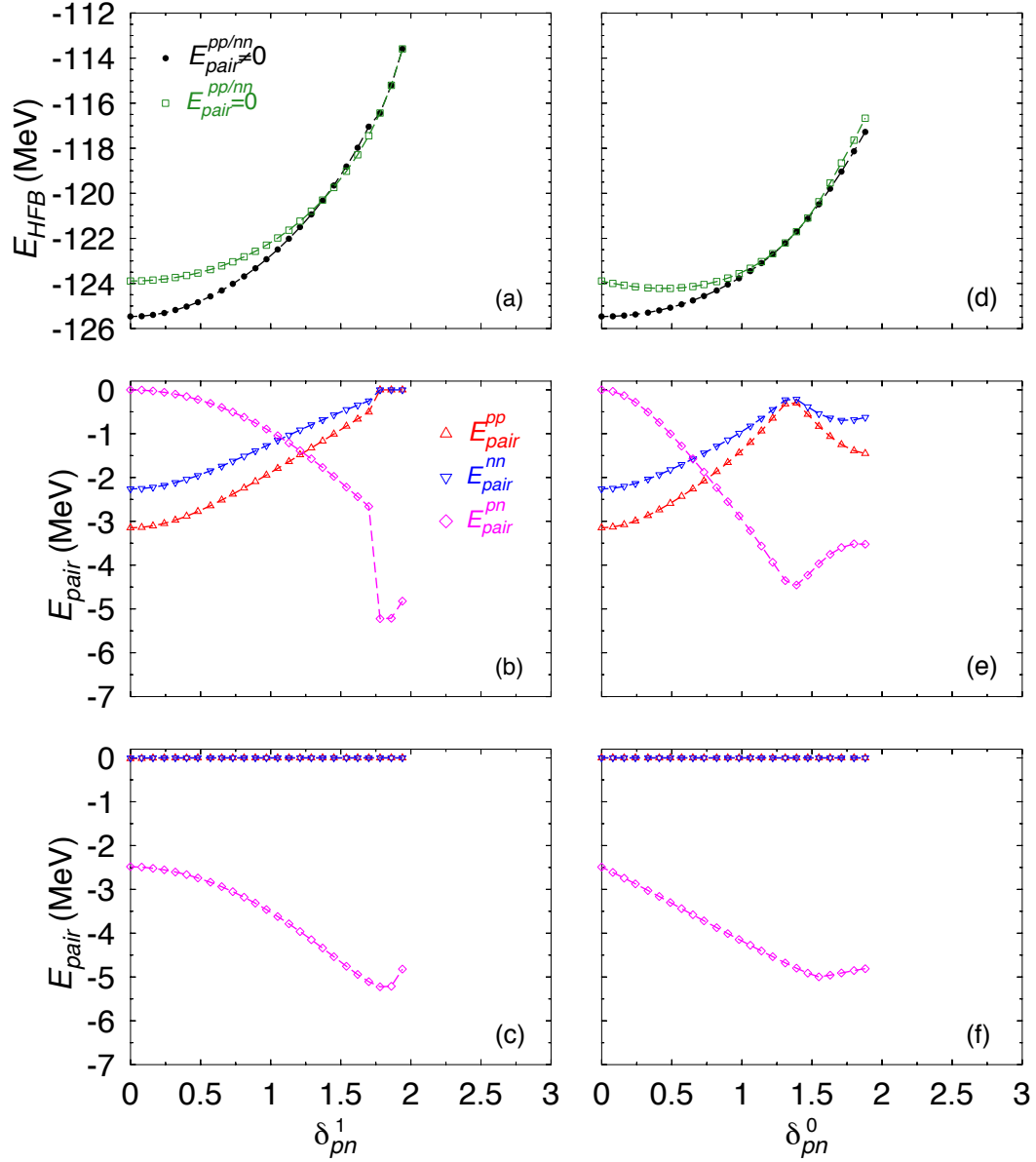


Figura 6.8: Energía HFB (paneles superiores) y de apareamiento para las ramas con  $E_{pp/nn} \neq 0$  (paneles intermedios) y  $E_{pp/nn} = 0$  (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(c)  $\delta_{pn}^1$  y (d)-(f)  $\delta_{pn}^0$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD.

formación de pares  $pn$ , en los paneles (b) y (e) podemos observar como las energías de apareamiento  $pp$  y  $nn$  decrecen (en valor absoluto) suavemente. Para el caso iso-

vectorial se ha encontrado una transición abrupta entre ambas ramas<sup>4</sup> en torno a  $\delta_{pn}^1 \approx 1,74$ , que también se percibe claramente en la curva de energía HFB total. En cuanto a las soluciones sin apareamiento  $pp/nn$ , cabe destacar que las correlaciones  $pn$  están presentes en todo momento (ver paneles (c) y (f)), presentando incluso -2.5 MeV para el estado con  $\delta_{pn}^{0,1} = 0$ .

El segundo aspecto que debe mencionarse se refiere al comportamiento cualitativo de la curva de energía  $pn$ . En cualquiera de las dos posibles ramas, observamos que para un valor elevado de  $\delta$ , esta energía alcanza un mínimo, produciéndose un descenso más o menos notorio. Así, es interesante notar el caso isoescalar: si bien coexisten todos los apareamientos, para el mínimo en  $E_{pair}^{pn}$ , las correlaciones  $E_{pp/nn}$  son escasas, por lo que las dos ramas de soluciones se encuentran prácticamente degeneradas. A partir de dicho punto, además, en el panel (e) encontramos una considerable disminución (en valor absoluto) en la energía de apareamiento  $pn$ . Este fenómeno, junto con la presencia de apareamiento en puntos con  $\delta = 0$  debe atribuirse al modo en el que se impone la ligadura en la deformación. En efecto, si bien los estados intrínsecos satisfacen  $\langle \hat{Q}_{20} \rangle$ , la deformación cuadrupolar en protones y neutrones pueden ser no nulas –cumpliendo  $\langle \hat{Q}_{20,p} \rangle + \langle \hat{Q}_{20,n} \rangle = 0$ – por lo que las correlaciones de apareamiento no serán las propias del estado totalmente esférico.

Por último, las curvas de energía total, también difieren en comparación con la exploración de los canales previos. En general, según se añaden correlaciones  $pn$  en cualquiera de los dos canales, la energía total se aleja del mínimo autoconsistente. Aún con esto, se percibe un leve mínimo en el panel (d) para el caso sin apareamiento  $pp/nn$  en torno a  $\delta_{pn}^0 \approx 0,5$ , aunque este se halle por encima de la otra rama de soluciones.

Si se realiza la proyección a buen número de partículas sobre los estados intrínsecos HFB, los resultados anteriores son aún más curiosos. En la Fig. 6.9 se han representado las curvas de energía total anteriores, para las dos posibles ramas tanto en el

---

<sup>4</sup>Esta exclusión de soluciones, junto a la diferencia de energías totales en ambas, puede explicarse si se entiende el campo de apareamiento  $\Delta$  como un vector en el espacio de isospín en la representación esférica[154]. Si para los casos  $N = Z$  se puede demostrar que las soluciones con  $\Delta_{a_p b_p} = \Delta_{a_n b_n} = 0$  y  $\Delta_{a_p b_n} = 0$  están degeneradas, en un caso general como este surgen dos soluciones diferentes. Este fenómeno desaparece en el caso de utilizar la minimización PNVAP (resultados no mostrados), donde coexisten las tres componentes del campo de apareamiento en todo momento.

canal isovectorial como isoescalar, junto con la curva de energía proyectada a buen  $N$  y  $Z$  (PNPAV). En ambos canales observamos la misma fenomenología: cuando los estados intrínsecos no presentan apareamiento  $pp/nn$ , la proyección produce soluciones de mayor energía. Este hecho, por tanto, implica que el tratamiento de los pares  $pn$  a nivel HFB no es el adecuado, por lo que será necesario (aunque está fuera de los objetivos de esta tesis) incluir otras técnicas como la restauración de la simetría de isospín.

Aún con esto, mientras que en la curva en  $\delta_{pn}^1$  los mínimos corresponden a  $\delta_{pn}^1 = 0$ , al explorar el canal isoescalar, observamos en el panel 6.9 (c) que la energía proyectada alcanza su mínimo valor en torno a  $\delta_{pn}^0 = 0.5$ .

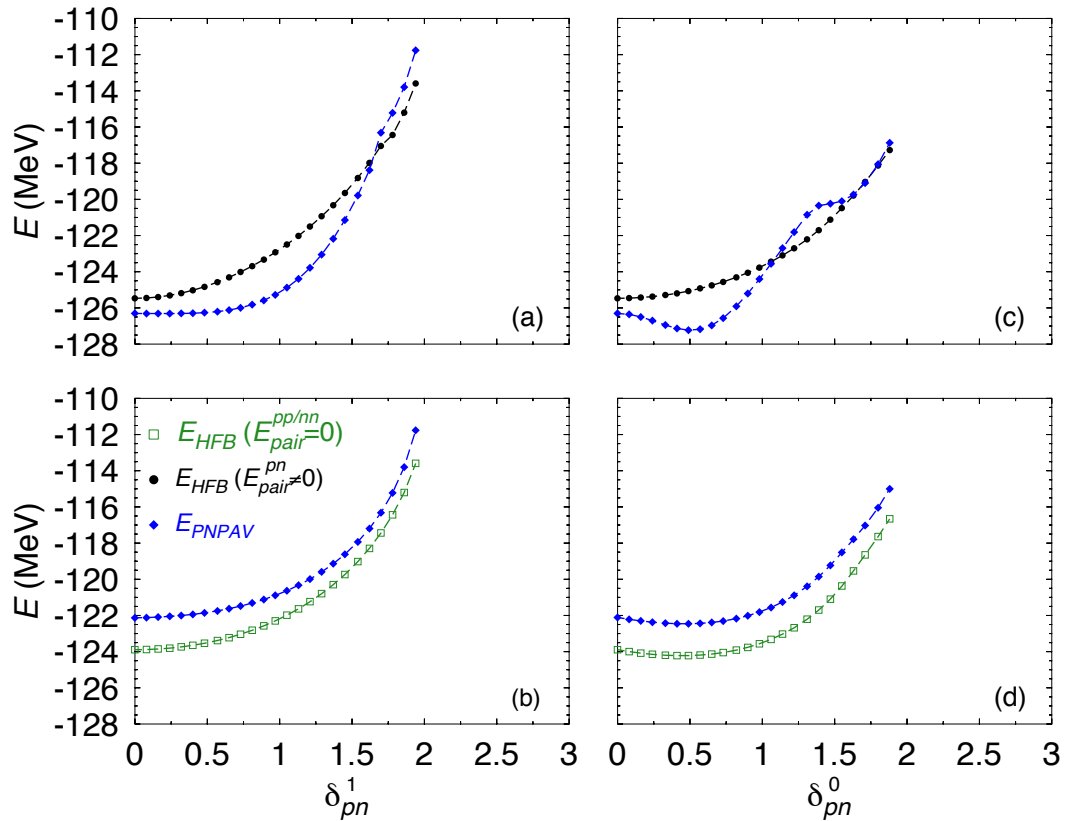


Figura 6.9: Energía HFB y PNPV (ver texto) para las ramas con  $E_{pp/nn} \neq 0$  (paneles superiores) y  $E_{pp/nn} = 0$  (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pn}^1$  y (c)-(d)  $\delta_{pn}^0$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD.



Por último, en términos de los números de ocupación, se observa que el aumento en las correlaciones de apareamiento  $pn$ , independientemente del canal que se explore, produce una variación conjunta en el llenado de las órbitas de protones y neutrones. En la Fig. 6.10 se puede observar un comportamiento similar al caso anterior, donde se promociona un neutrón a la subcapa  $0d_{3/2}$ . En cualquier caso, vemos de nuevo que la exploración de estos grados de libertad permite la ruptura de pares de partículas, o –dicho de otro modo– la obtención de otras configuraciones partícula-hueco.

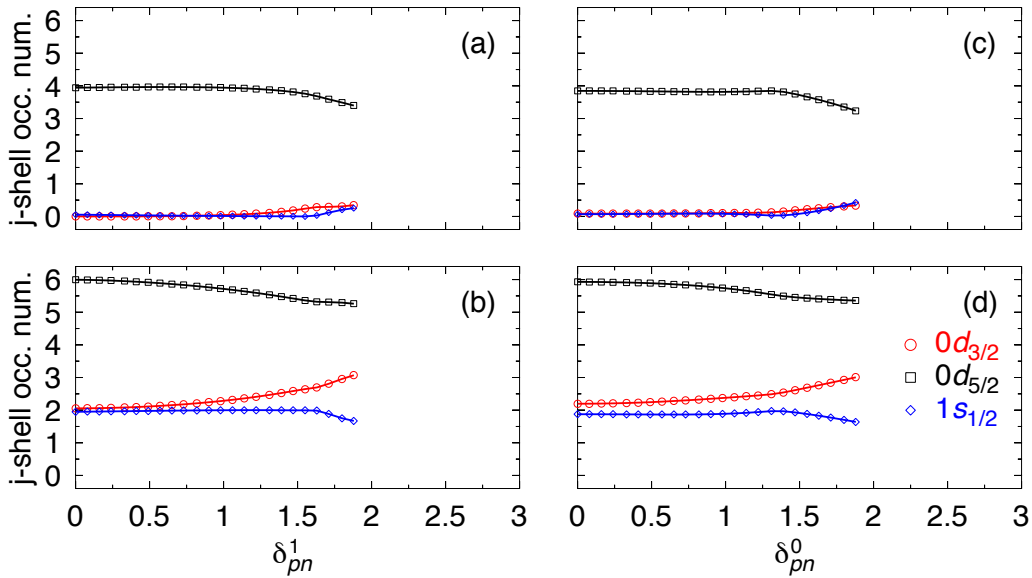


Figura 6.10: Ocupaciones de las subcapas  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$  y  $0d_{3/2}$  de protones (paneles superiores) y neutrones (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pn}^1$  y (c)-(d)  $\delta_{pn}^0$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD.

### 6.3. Probabilidades de transición Gamow-Teller con el método PGCM

Una de las aplicaciones inmediatas de la inclusión de correlaciones  $pn$  reside en poder hallar el solape entre funciones de onda par-impar y par-impar, dado que la paridad global del número es la misma en los estados final e inicial. Así, en el caso de

preservar la estructura de bloques separados, la paridad del número será distinta en protones y neutrones, por lo que el solape anterior sería nulo y el teorema de Wick generalizado no sería aplicable.

Dado que los cálculos PGCM con interacciones fenomenológicas, como las de Gogny o Skyrme, no incluyen la mezcla  $pn$ , este tipo de transiciones no se evalúan habitualmente. En el caso de interacciones ajustadas a espacios de valencia, recientemente se han obtenido probabilidades de transición  $\beta$  con este formalismo, si bien no se han considerado todas las correlaciones de apareamiento como coordenadas generadoras, ni se analiza el efecto que cada una de éstas produce sobre dichos valores[103]. En este apartado, a modo de ejemplo, se obtendrán las probabilidades de transición Gamow-Teller de la desintegración  $^{31}\text{Al} \rightarrow ^{31}\text{Si}$ <sup>5</sup> con distintos esquemas variacionales que exploran los grados de libertad de deformación cuadrupolar y apareamiento[156].

Para los dos núcleos involucrados, se han obtenido vía PNVAP cinco conjuntos de estados en los que se exploran los siguientes grados de libertad: deformaciones cuadrupolares y amplitudes de apareamiento  $pp$ ,  $nn$ ,  $pn$  con  $T_p = 0, 1$ . Además, en el caso de explorar una de las amplitudes de apareamiento, se han impuesto ligaduras en el resto de los  $\delta_{M J_p M T_p}^{J_p T_p}$ , cuyos valores son los asociados al mínimo local del cálculo sin restricciones (ver Cuadro 6.1).

Núcleo	$\delta_{0-1}^{01}$	$\delta_{0+1}^{01}$	$\delta_{00}^{01}$	$\delta_{00}^{10}$	$\delta_{\pm 10}^{10}$
$^{31}\text{Al}$	1.10	1.33	0.00	0.06	0.10
$^{31}\text{Si}$	1.56	0.95	0.72	0.00	0.00

Cuadro 6.1: Parámetros de apareamiento  $\delta_{M J_p M T_p}^{J_p T_p}$  –dados por las definiciones (3.22)– autoconsistentes del estado de mínima energía para el  $^{31}\text{Al}$  y  $^{31}\text{Si}$  en el cálculo PNVAP sin ligaduras con la interacción USD.

En la Fig. 6.11 se muestra el espectro de bajas energías del  $^{31}\text{Al}$  explorando en los canales de apareamiento anteriores, junto con la mezcla de todas las amplitudes de apareamiento y explorando deformaciones cuadrupolares.

Se observa que, en general, cualquiera de las coordenadas describe razonablemente

<sup>5</sup>Para este caso, se conoce que el mecanismo de la desintegración es puramente de tipo Gamow-Teller[155], por lo que se omite el cálculo de las probabilidades de transición de tipo Fermi.

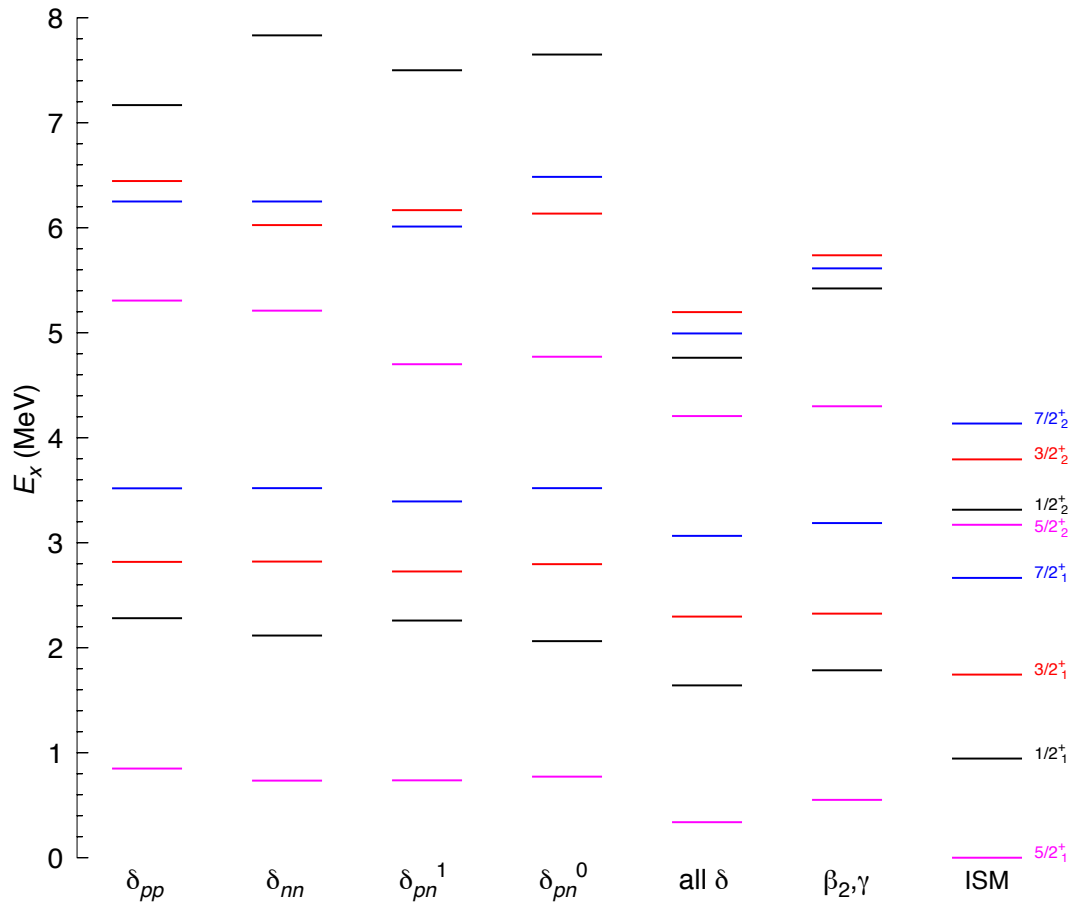


Figura 6.11: Espectro de bajas energías de paridad positiva hasta  $J = 7/2$  y  $\sigma = 2$  del isótopo  $^{31}\text{Al}$  obtenidos con el método PGCM y las diferentes coordenadas generadoras. Se incluye el cálculo ISM (última columna). En ambos casos se ha tomado la interacción USD y las energías están normalizadas a la energía del estado fundamental exacta.

bien los estados yrast, mientras que para  $\sigma = 2$ , en comparación con el espectro exacto, las energías se encuentran demasiado alejadas de los estados anteriores. Así, el generador que mejor describe la estructura del Al es el que incluye la mezcla de estados con diferentes amplitudes de apareamiento, cuyo estado fundamental y resto de estados excitados presentan una energía más cercana a la exacta. En dicho cálculo, aunque obtenemos un estados fundamental a menos de 200 keV del exacto, seguimos presentando un espectro notablemente estirado. Con esto, vemos que los

primeros estados excitados que se necesitan para describir la transición GT pueden ser descritos correctamente con cualquiera de los métodos, si bien se espera que la mezcla de los diferentes  $\delta$  produzca una mejor descripción de esta desintegración.

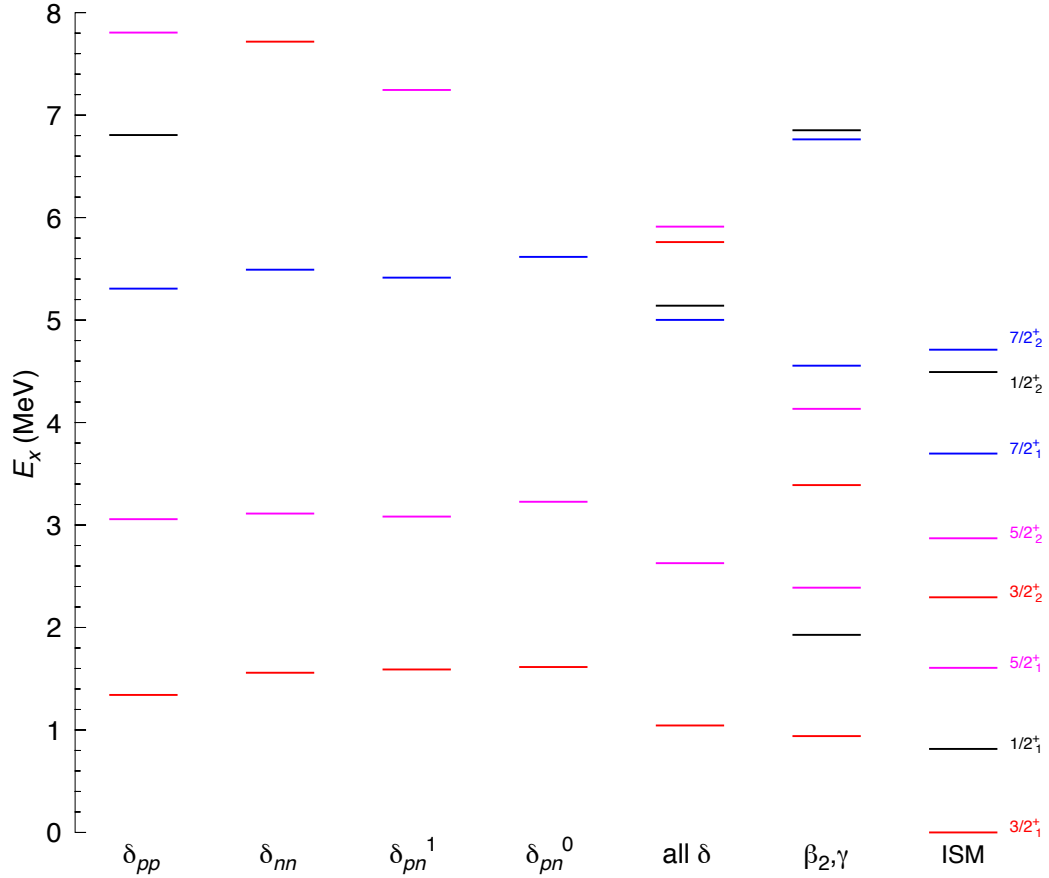


Figura 6.12: Espectro de bajas energías de paridad positiva hasta  $J = 7/2$  y  $\sigma = 2$  del isótopo  $^{31}\text{Si}$  obtenidos con el método PGCM y las diferentes coordenadas generadoras. Se incluye el cálculo ISM (última columna). En ambos casos se ha tomado la interacción USD y las energías están normalizadas a la energía del estado fundamental exacta. Se muestran solamente los estados con energías de excitación inferiores a 8 MeV.

En el caso del isótopo de Si, sin embargo, vemos que la mayoría de aproximaciones no son tan buenas como en el caso anterior. En la Fig. 6.12 se puede observar que cualquiera de los canales de apareamiento genera espectros demasiado estirados en comparación con el exacto.

También encontramos una gran dificultad a la hora de describir los estados con  $J = 1/2$ . En efecto, baste con notar la energía de excitación de la banda  $1/2_2$  en la malla  $\delta_{pn}^1$ , donde surge una diferencia de 15 MeV aproximadamente respecto de su homólogo exacto. Dicho estado empeora aún más en la malla en  $\delta_{pn}^0$ , donde se encuentra por encima de los 20 MeV respecto del fundamental, por lo que ni siquiera se muestra en la representación. En cuanto a las bandas  $3/2_2$  y  $5/2_2$  nos encontramos que se encuentran por encima de la  $7/2_1$  y sus posiciones varían según el esquema variacional.

Incluyendo todos los canales, el estado fundamental ahora se sitúa a 1 MeV aproximadamente del valor exacto. Aún así, la descripción cualitativa del conjunto de estados sigue siendo notablemente distinta. Este hecho, por tanto, sugiere que en las mallas de estados escogidas estamos excluyendo grados de libertad internos cruciales para poder describir este isótopo. En efecto, la última aproximación variacional, que explora el plano de deformaciones cuadrupolares, produce unos resultados mucho más parecidos a los exactos. Por ejemplo, en este último cálculo encontramos que los estados  $1/2_1$  y  $7/2_1$  recuperan su posición como primer y quinto estado excitado y la separación entre las bandas es mucho menor en comparación con las aproximaciones anteriores.

Una vez halladas las funciones de onda PGCM, en el Cuadro 6.2 se muestran los valores para la probabilidad de transición  $B(GT)$  entre diferentes bandas de energía según los distintos esquemas variacionales.

En primer lugar, destacamos que la transición entre estados fundamentales presenta un grado de exactitud muy bueno independientemente de la aproximación. Aún así, las mallas de puntos que mejor describen esta probabilidad es la  $\beta_2, \gamma$ , con un error relativo del 3% aproximadamente. La peor aproximación la encontramos en la malla en  $\delta_{nn}$  con un error relativo del 41.6%. Si bien puede parecer una gran diferencia, en defensa de estas aproximaciones cabe destacar que todas presentan el mismo orden de magnitud y resultados más que aceptables teniendo en cuenta los valores habituales que se obtienen en este espacio de valencia[157, 158].

En segundo lugar, vemos que las transiciones al resto de estados excitados del  $^{31}\text{Si}$  no presentan la misma exactitud. Como ejemplo, baste tomar la desintegración al estado  $3/2_2$ , donde los resultados varían desde  $10^{-4}$  (para las mallas en  $\delta_{nn}$ ) hasta

$J_f\sigma_f$	$\delta_{pp}$	$\delta_{nn}$	$\delta_{pn}^1$	$\delta_{pn}^0$	mezcla $\delta$ 's	$\beta_2, \gamma$	ISM
3/2 <sub>1</sub>	0.194	0.122	0.226	0.160	0.169	0.202	0.209
3/2 <sub>2</sub>	0.086	0.000	0.003	0.192	0.213	0.463	0.404
5/2 <sub>1</sub>	0.200	0.1691	0.150	0.190	0.110	0.129	0.089
5/2 <sub>2</sub>	0.047	0.016	0.050	0.003	0.010	0.007	0.006
7/2 <sub>1</sub>	0.000	0.001	0.001	0.000	0.001	0.002	0.006
7/2 <sub>2</sub>	0.223	0.039	0.016	0.065	0.001	0.017	0.022

Cuadro 6.2: Probabilidades de transición GT entre el  $^{31}\text{Al}$  (5/2<sub>1</sub>) y el  $^{31}\text{Si}$ ( $J_f\sigma_f$ ) con los distintos generadores de coordenadas y el resultado exacto ISM, ambos con la interacción USD.

0,46 (para las mallas en  $\beta_2, \gamma$ ), en la mejor de las aproximaciones. Esto era esperable teniendo en cuenta los espectros obtenidos para el isótopo de Si. Dado que la ordenación de las distintas bandas para este último isótopo difieren considerablemente entre un esquema y otro, es lógico pensar que los elementos de matriz GT también tengan este mismo comportamiento.

Como conclusión de este estudio pionero sobre transiciones  $\beta$  con el método PGCM, vemos que es necesario que los núcleos final e inicial estén razonablemente bien descritos en el conjunto de los estados involucrados para que este tipo de desintegraciones pueden también describirse con el mismo grado de exactitud. Además, no se ha encontrado una relación notoria entre alguno de los canales de apareamiento y este observable, por lo que no podemos inferir si alguno de estos grados de libertad tiene mayor relevancia que otro. En efecto, una vez más, el tamaño de esta capa es el principal obstáculo en la descripción y análisis de las correlaciones de apareamiento.

## 6.4. Elementos de matriz nucleares de la desintegración $0\nu\beta\beta$ con el método PGCM

Empleando la interacción efectiva KB3G analizaremos el efecto que produce cada una de las coordenadas generadoras ya habituales en el cálculo del elemento de matriz nuclear de esta desintegración. Además, se analizará por separado los términos de Fermi, Gamow-Teller y tensorial. En primer lugar, centraremos la atención en el caso  $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{48}\text{Ti}$ , uno de los candidatos experimentales a esta desintegración[159], en

segundo, se generalizará el estudio a otras transiciones entre los mismos elementos con distinto número másico,  ${}^A\text{Ca} \rightarrow {}^A\text{Ti}$ , que pueden ser estudiadas en la capa  $pf$ , analizando de forma sistemática el papel de los distintos grados de libertad.

### 6.4.1. Análisis de la desintegración del ${}^{48}\text{Ca}$ al ${}^{48}\text{Ti}$

Antes de comenzar el estudio con las correlaciones de apareamiento en los diferentes canales, es conveniente comprobar que el método empleado es capaz de producir resultados similares obtenidos en la bibliografía citada. En concreto, se ha tomado como referencia los resultados obtenidos con el método IMSRG+GCM de Yao et al.[149], mostrados en la Fig. 6.13.

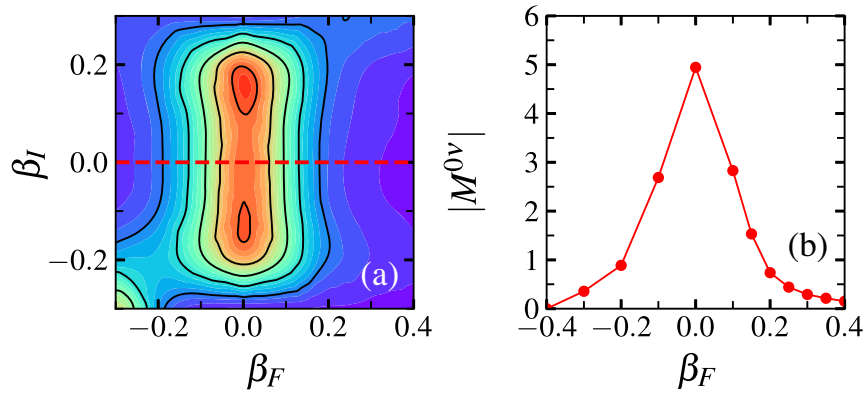


Figura 6.13: Elementos de matriz nuclear total,  $M^{0\nu}$  (a) en función del parámetro  $\beta$  del Ca  $-\beta_I-$  y del Ti  $-\beta_F-$  y (b) en función de  $\beta_F$  para  $\beta_I=0.00$ , siendo  $\beta = (4\pi/3r_0A^{5/3})\sqrt{q_{20}^2 + 2q_{22}^2}$ . Extraído de [149].

#### Efecto de la deformación axial y mezcla $pn$

Se ha construido una malla de estados intrínsecos axiales con ligaduras en el parámetro de deformación  $\beta_2$ , tanto en el núcleo inicial como en el final resolviendo las ecuaciones variacionales con el método PNVAP. Además, dado que la mezcla protón-neutrón juega un papel importante en el estudio de esta desintegración, se analiza también el efecto de permitirla o no. Para el primero de los casos, se ha empleado la semilla axial que no mezcla protones y neutrones, mientras que para el segundo se ha utilizado la semilla más general, rompiendo así la simetría axial y

permitiendo la mezcla. Además, dichas funciones de onda presentaban pares  $pn$  con  $T_p = 0$  o  $T_p = 1$  de forma excluyente, esto es, sin darse a la vez en ningún estado del Ti. Así, para simplificar el análisis se ha separado el cálculo con mezcla de nucleones en dos: uno en el que solo hay pares  $pn$  isoescales, fijando  $\delta_{pn}^1 = 0$  como ligadura y otro en el que solo hay de tipo isovectorial, fijando  $\delta_{pn}^0 = 0$ . en ningún caso la amplitud de apareamiento  $M_J = \pm 1$  se ha observado distinta de cero.

Así, en la Fig. 6.14 se muestran los resultados obtenidos para los elementos de matriz de Fermi, Gamow-Teller, tensorial y total cuando no se permite la mezcla  $pn$  ((a)  $\rightarrow$  (d)), cuando solo hay pares con  $T_p = 0$  ((e)  $\rightarrow$  (h)), y con  $T_p = 1$  ((i)  $\rightarrow$  (l)). Cada punto de la superficie se ha normalizado dividiendo entre la raíz del producto de la normas de los estados final e inicial, esto es,

$$M_k^{0\nu} = \frac{\langle \psi^{Z_v=2, N_v=6; J=0} | \hat{M}_k^{0\nu} | \psi^{Z_v=0, N_v=8; J=0} \rangle}{\langle \psi^{Z_v=2, N_v=6; J=0} | \psi^{Z_v=2, N_v=6; J=0} \rangle^{1/2} \langle \psi^{Z_v=0, N_v=8; J=0} | \psi^{Z_v=0, N_v=8; J=0} \rangle^{1/2}} \quad (6.3)$$

siendo  $k = F, GT, T$  y  $|\psi^{Z_v N_v J=0}\rangle = P^{Z_v} P^{N_v} P_{00}^0 |\phi(\beta_2)\rangle$ , es decir, el estado intrínseco obtenido con PNVAP proyectado al número de partículas correspondiente y momento angular  $J = 0$ . Además, el elemento de matriz total vendrá dado por la expresión (3.152).

Aunque la distribución de los elementos de matriz nucleares es similar al cálculo *ab initio*, vemos que la deformación máxima permitida en nuestros resultados es notablemente menor. Esto se debe, por un lado, a una ligera diferencia en la definición del parámetro  $\beta_2$  implementada en TAURUS, por otro y principalmente, a la inclusión de un menor número de capas en el espacio de valencia, dado por la interacción KB3G.

En el caso de no incluir la mezcla  $pn$  se observa una simetría clara entre la región oblada y prolada para el  $^{48}\text{Ca}$ , con curvas de nivel muy suaves en función de  $\beta_{2i}$ , alcanzando los valores máximos para el estado esférico del  $^{48}\text{Ti}$ ,  $\beta_{2f} = 0$ . Además, del mismo modo que en los resultados *ab initio*, el elemento de matriz nuclear total presenta dos pequeñas regiones  $M_{tot}^{0\nu} \approx 3$  para  $\beta_{2i} \approx -0.07, 0.08^6$ , siendo esta última

<sup>6</sup>Aunque las superficies con estados que no incluyen la mezcla alcanzan valores hasta  $\beta_{2f} = -0.12$ , para una comparación sencilla con el resto de paneles se ha fijado el mismo intervalo (menor) en esta variable.



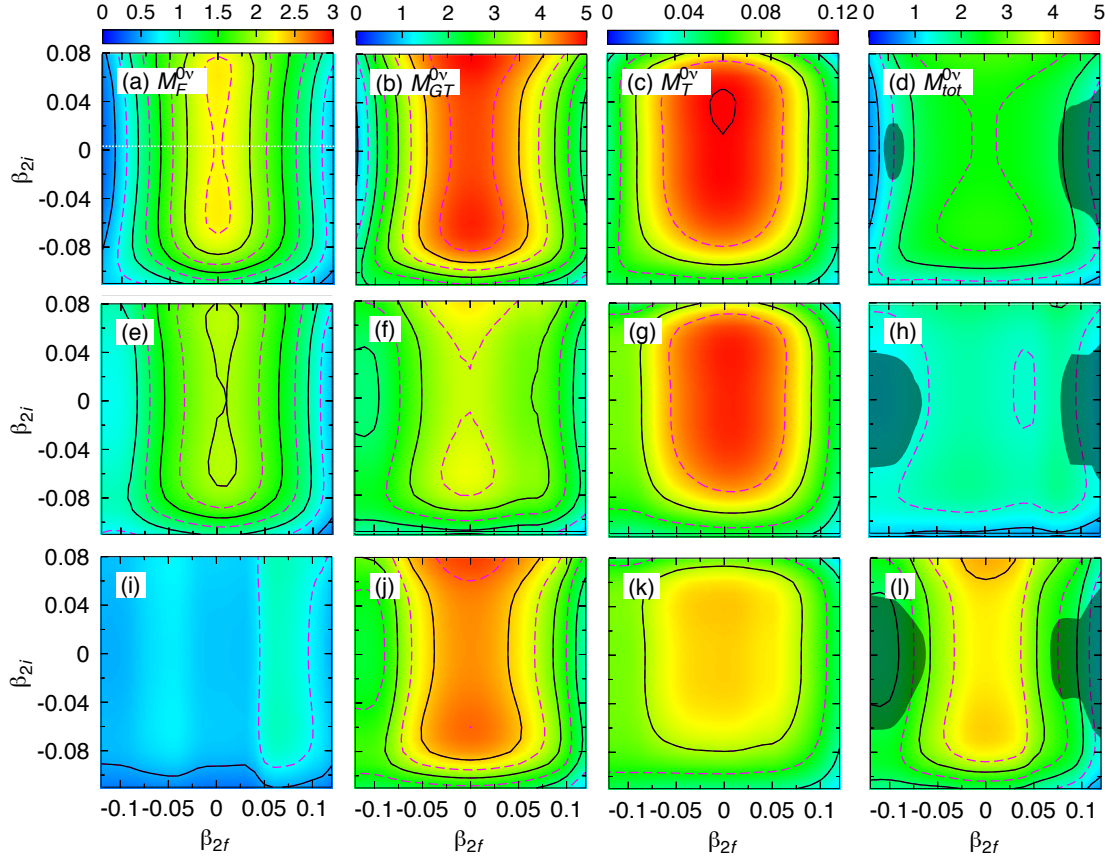


Figura 6.14: Elementos de matriz de  $M_F^{0\nu}$  (en valor absoluto),  $M_{GT}^{0\nu}$ ,  $M_T^{0\nu}$  y  $M_{tot}^{0\nu}$  en función del parámetro  $\beta_2$  del  $^{48}\text{Ca}$  ( $\beta_{2i}$ ) y del  $^{48}\text{Ti}$  ( $\beta_{2f}$ ) sin incluir la mezcla  $pn$  (fila superior), incluyendo pares  $pn$  isoescalares (fila intermedia) e isovectoriales (fila inferior). Las zonas sombreadas representan las regiones exploradas por las funciones de onda colectivas.

última algo más ancha que la primera. Esto está en perfecto acuerdo con la Fig. 6.13, donde los máximos se centran en los puntos  $\beta_I \approx -0.15, 0.15$ , siendo el máximo prolado ligeramente más ancho y ambos con un valor algo superior a 5.

Centrándonos ahora en la influencia de las correlaciones  $pn$ , vemos que la inclusión de pares con  $T_p = 0$  disminuye el valor de  $M_{tot}^{0\nu}$  considerablemente en las regiones en las que los estados intrínsecos presentan una mayor amplitud en dicho canal. En efecto, mientras que en las regiones de mayor deformación –tanto para el Ca como para el Ti– la inclusión de estas correlaciones parece no variar demasiado el

elemento de matriz, en los puntos cercanos al esférico el efecto es más que apreciable. Por ejemplo, el elemento de matriz que conecta los estados esféricos final e inicial presenta un valor de 1.61, mientras que en el cálculo que mantiene la estructura de bloques separados en protones y neutrones se alcanza el valor de 2.50.

En el caso de permitir la formación de pares  $pn$  isovectoriales, vemos que el efecto es precisamente contrario al anterior –ver panel (l)– potenciando el elemento de matriz total en, prácticamente, toda la región mostrada. Así, ahora el valor que obtenemos al calcular el valor medio con los estados esféricos es de 3.80 aproximadamente. De nuevo, este hecho se puede explicar en términos de la amplitud de las correlaciones en este canal. En la Fig. 6.15 vemos que el canal isovectorial presenta una mayor amplitud en todo el intervalo en  $\beta_{2f}$ , incluso en los extremos prolado y oblado.

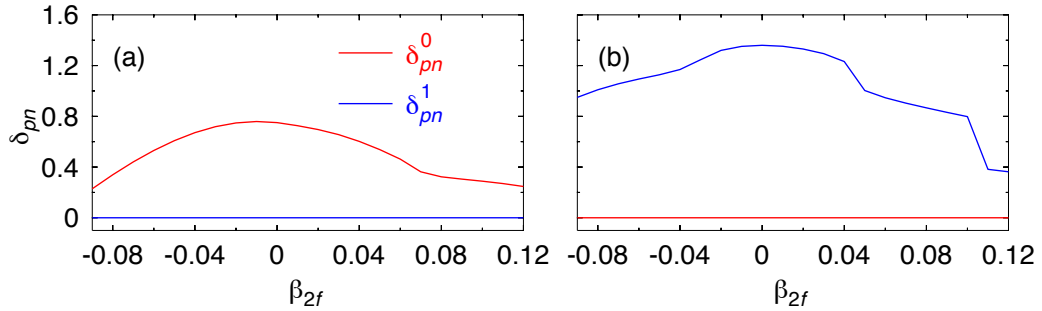


Figura 6.15: Amplitudes de los canales de apareamiento  $pn$  isoescalar e isovectorial para los estados intrínsecos del  $^{48}\text{Ti}$  (a) con  $\delta_{pn}^1 = 0$  y (b) con  $\delta_{pn}^0 = 0$  en función del parámetro de deformación  $\beta_2$ .

Analizando los diferentes elementos de matriz, vemos también que el canal isoescalar tiene un mayor impacto en el de Gamow-Teller. En efecto, si se comparan los paneles (f) y (j) de la Fig. 6.14, vemos que la inclusión de estos pares reduce hasta 3 unidades el  $M_{GT}^{0\nu}$  con respecto al cálculo sin pares  $pn$ , mientras que los pares isovectoriales disminuyen levemente esta cantidad en las regiones cercanas a  $\beta_{2i} = 0$ .

En cuanto al  $M_F^{0\nu}$ , cabe decir que presenta valores negativos en toda la región, y en los tres casos analizados por lo que se han representado sus valores absolutos. Se observa que la influencia del canal isoescalar es pequeña, siendo más relevante la disminución en la región cercana al estado esférico del Ti. Así, las mayores diferencias

con el caso sin la mezcla  $pn$  son de 0.5 aproximadamente. Sin embargo, en el caso de tener el canal  $pn$  isovectorial distinto de cero, este elemento de matriz disminuye de forma considerable en toda la región mostrada, siendo más llamativo la zona con  $\beta_{2f} = 0$ , donde dicho elemento de matriz se reduce en hasta dos unidades.

Por último, en cuanto a la parte tensorial, percibimos una leve disminución cuando existen pares  $pn$  con  $T_p = 1$ , si bien, dado el orden de magnitud, el efecto sobre el elemento de matriz nuclear total es despreciable.

A modo de resumen de todo lo anterior, si se toma como referencia el cálculo sin mezcla  $pn$ , se observa que la inclusión de este apareamiento reduce tanto la parte GT como la de F en ambos casos ( $T_p = 0, 1$ ). Sin embargo al incluir solo pares isovectoriales, la reducción de  $M_F^{0\nu}$  es considerable, mientras que  $M_{GT}^{0\nu}$  no varía en exceso, lo que produce un efecto neto de aumento en el elemento de matriz total. En cuanto a la inclusión de pares isoescalares, el elemento de matriz de Femi no se reduce tanto, con lo que el resultado global supone una disminución del elemento de matriz total.

El resultado final debe tener en cuenta la mezcla de configuraciones dentro del marco PGCM, esto es,  $\langle \Psi_f^{\Gamma_f}(\beta_{2f}) | \hat{M}_k^{0\nu} | \Psi_i^{\Gamma_i}(\beta_{2i}) \rangle$ . Así, los valores medios entre los estados final e inicial  $0_1^+$  quedan resumidos en el Cuadro 6.3.

	$M_F^{0\nu}$	$M_{GT}^{0\nu}$	$M_T^{0\nu}$	$M_{tot}^{0\nu}$	$E_{0+}(^{48}\text{Ti})$ [MeV]	$E_{0+}(^{48}\text{Ca})$ [MeV]
PGCM <sub>1</sub>	-0.44	1.71	0.055	1.33	-22.61	
PGCM <sub>2</sub>	-0.61	1.30	0.056	0.75	-22.97	-7.31
PGCM <sub>3</sub>	-0.52	1.82	0.052	1.34	-22.89	

Cuadro 6.3: Elementos de matriz nucleares de la transición  $0\nu\beta\beta$  del  $^{48}\text{Ca}$  al  $^{48}\text{Ti}$  explorando  $\beta_2$  sin mezcla  $pn$  (PGCM<sub>1</sub>), con correlaciones  $pn$  isoescalares (PGCM<sub>2</sub>) e isovectoriales (PGCM<sub>3</sub>), junto con las energías del estado fundamental del Ti y Ca obtenidas con los distintos esquemas variacionales.

A primera vista sorprende que el  $M_F^{0\nu}$  sea más elevado (en valor absoluto) en los casos que se permite la mezcla  $pn$ . Sin embargo, para los términos de GT y T, los resultados son más acordes con las superficies mostradas. Este hecho está estrechamente ligado a las regiones del plano que explora la función de onda colectiva, representadas en la Fig. 6,14, lo que contrarresta dichos cambios y hacen que los resultados PGCM sean más parecidos en los tres casos analizados. No obstante, se

observa que la inclusión de pares  $pn$  isoescalares reduce el elemento de matriz, de acuerdo con los resultados de las referencias [144, 149]. Estas diferencias, como se puede ver en el Cuadro 6.3, no se reflejan en la descripción del estado fundamental del  $^{48}\text{Ti}$ , por lo que el elemento de matriz nuclear total es más sensible a los detalles de la función de la onda.

### Efecto de las correlaciones de apareamiento

Pasamos ahora a analizar el papel de cada uno de los canales de apareamiento cuando se exploran explícitamente estos grados de libertad en el  $^{48}\text{Ti}$ . Para reducir lo máximo posible el efecto de variar las deformaciones cuadrupolares se ha impuesto como ligaduras los valores  $\beta_2$  autoconsistentes para el  $^{48}\text{Ca}$  y el  $^{48}\text{Ti}$ , esto es  $\beta_{2i} = 0$  y  $\beta_{2f} = -0.063$ . También se han impuesto ligaduras en las distintas amplitudes de apareamiento en los valores asociados al mínimo del núcleo final, esto es,  $\delta_{pp,f} = 1.228$ ,  $\delta_{pp,f} = 1.925$  y  $\delta_{pn,f}^0 = \delta_{pn,f}^1 = 0$ . Además, el núcleo inicial en el estado esférico no presenta energía de apareamiento en ningún canal. De este modo, podremos a primer orden la evolución de los distintos elementos de matriz de la transición  $0\nu\beta\beta$  a la variación del apareamiento del  $^{48}\text{Ti}$  en el canal que se explora explícitamente en cada cálculo. Para garantizar lo anterior, y teniendo en cuenta que la convergencia del gradiente es tediosa al variar estas amplitudes cuando se emplean funciones de onda proyectadas a buen número de partículas, se han resuelto las ecuaciones HFB<sup>7</sup>.

Los resultados obtenidos se muestran en la Fig. 6.16, de donde podemos extraer algunas observaciones. En cuanto al elemento de matriz de Fermi, aumentar  $\delta_{pp/nn}$  hace que aumente suavemente, observándose una ligera disminución para valores extremos de apareamiento. En el caso de explorar  $\delta_{pn}^1$ , sin embargo, este se reduce –cambiando incluso de signo– sufriendo una variación abrupta para amplitudes elevadas. Por último, con la amplitud  $\delta_{pn}^0$  se observa casi constante, disminuyendo suavemente hasta anularse.

Por otro lado, el elemento de matriz de Gamow-Teller presenta un comportamiento cualitativo similar al de Fermi, salvo por el signo cambiado. Además, al explorar la formación de pares isovectoriales, este no varía prácticamente en toda la región

<sup>7</sup>Aunque no se muestran por simplicidad, se puede comprobar que las curvas  $M(\delta)$  empleando el método PNVAP presentan la misma estructura, si bien el rango de valores admitidos para los distintos  $\delta$  es mucho menor en comparación con HFB.

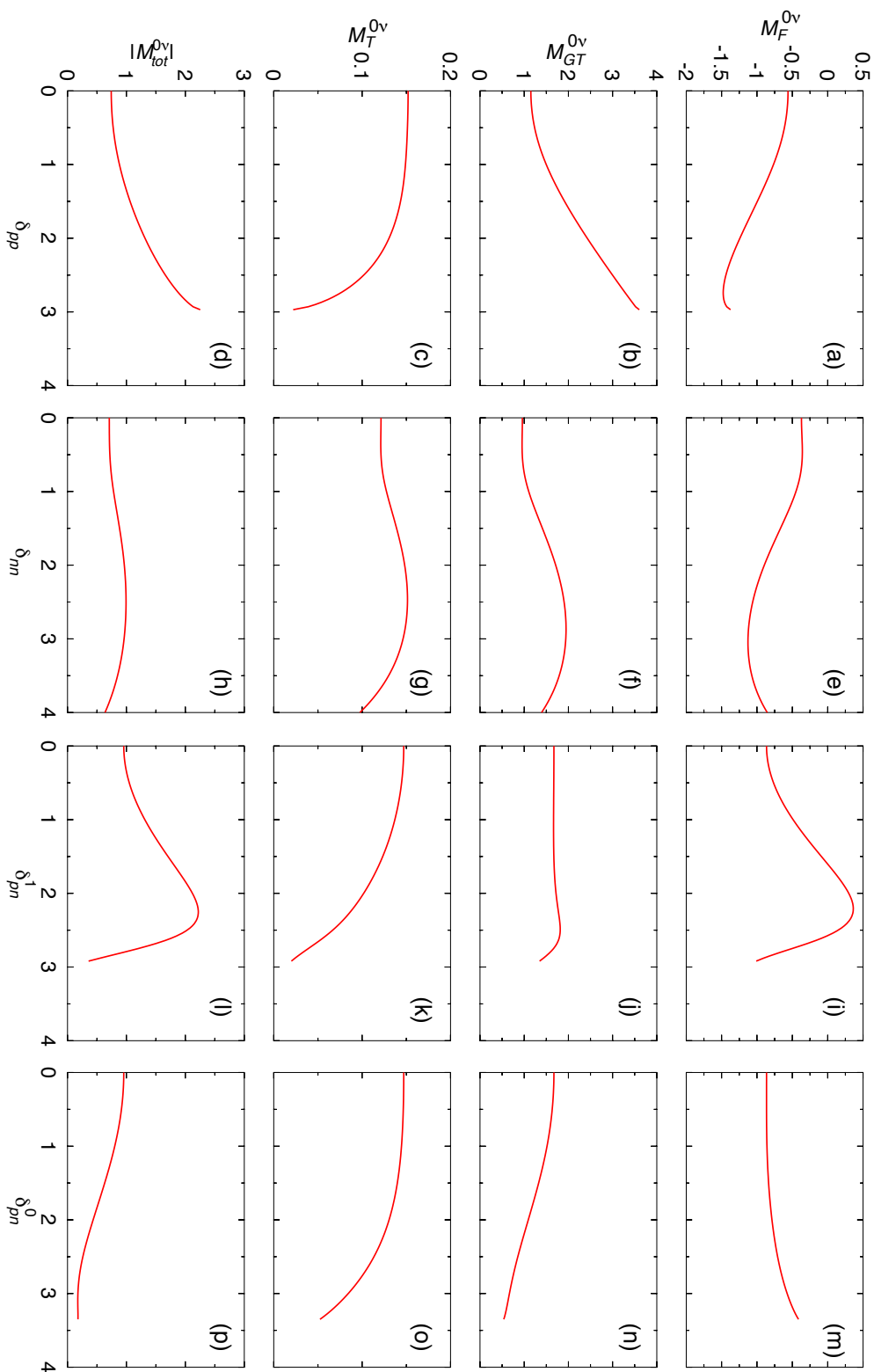


Figura 6.16: Elementos de matriz  $M_F$ ,  $M_{GT}$ ,  $M_T$  y  $M^{0v}$  en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(d)  $\delta_{pp}$ , (e)-(h)  $\delta_{mn}$ , (i)-(l)  $\delta_{pn}^1$  y (m)-(p)  $\delta_{pn}^0$  en el núcleo de  $^{48}\text{Ti}$  para la desintegración  $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{48}\text{Ti}$ .

explorada. En el caso de considerar los pares isoescalares, vemos que  $M_{GT}^{0\nu}$  disminuye ligeramente.

En cuanto al elemento de matriz tensorial, aunque en todo momento tenemos valores notablemente más pequeños, vemos en general una marcada disminución respecto del extremo  $\delta = 0$  (a excepción del canal  $nn$  que puede considerarse casi constante). Con todo lo anterior, el elemento de matriz total sigue prácticamente la misma fenomenología que el término de Gamow-Teller, esto es, crece con  $\delta_{pp}$ , es prácticamente constante en  $\delta_{nn}$  y decrece con  $\delta_{pn}^0$ . Además, en el caso de explorar  $\delta_{pn}^1$ , el comportamiento cualitativo sigue la misma tendencia que la curva de  $M_F^{0\nu}$ , sufriendo un marcado aumento y descenso.

De este modo, vemos que el elemento de matriz  $M_{tot}^{0\nu}$  no solo se reduce explorando las correlaciones de apareamiento con  $T_p = 0$ , si no que para valores extremos del canal  $T_p = 1$ ,  $M_{T_p} = 0$  también se puede observar esta misma reducción.

Teniendo en cuenta que el isótopo de  $^{48}\text{Ca}$  presenta apareamiento nulo en la aproximación HFB, es conveniente explorar la evolución de los distintos elementos de matriz según se introduce un mayor grado de correlaciones en este estado. Así, se ha construido una malla de estados intrínsecos HFB que varían en  $\delta_{nn,i}$  cuyos valores están comprendidos en el intervalo  $[0.00, 4.00]$ , de tal modo que evaluaremos el valor medio entre estados proyectados para cada punto  $(\delta_i; \delta_f)$ . Los resultados se muestran en la Fig. 6.17.

El término de Fermi alcanza los mayores valores (en valor absoluto) en el extremo de ambas amplitudes de apareamiento  $pp$  y  $nn$ . En el caso de explorar  $\delta_{pn,f}^1$ , también se observa este mismo hecho, sin embargo, aparece una región  $\delta_{pn,f}^1 \in [1.6; 2.6]$  donde  $M_F$  cambia de signo, contribuyendo a aumentar el elemento de matriz nuclear total. En estos tres casos, se observa una escasa dependencia en la amplitud  $\delta_{nn,i}$  hasta que la amplitud de apareamiento del Ti –cualquiera de las tres en los paneles (a), (b) y (c)– presenta un valor considerablemente alto. Este hecho se extrae de la poca verticalidad de las curvas de nivel mostradas. Sin embargo, la inclusión de correlaciones del canal isoescalar –panel (d)– presenta un comportamiento bien distinto. En este caso, para pequeñas amplitudes de apareamiento  $nn$  del  $^{48}\text{Ca}$ , este elemento de matriz tiende hacia valores más cercanos a cero, aunque la variación es menor en comparación con los canales anteriores. Aún así, cuando se incremen-

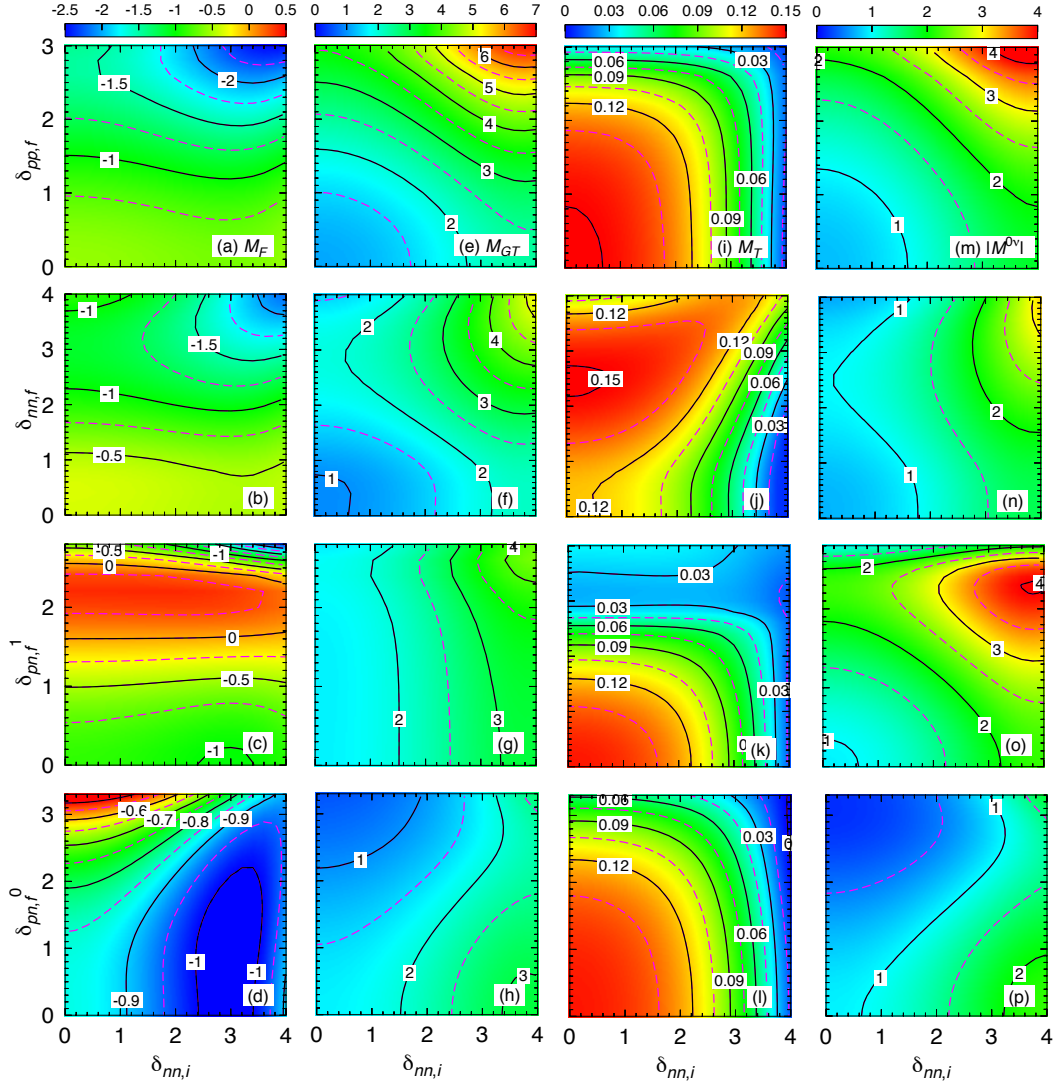


Figura 6.17: Elementos de matriz  $M_F$ ,  $M_{GT}$ ,  $M_T$  y  $M^{0\nu}$  entre estados HFB en función de  $\delta_{nn}$  del Ca y (a)-(d)  $\delta_{pp}$ , (e)-(h)  $\delta_{nn}$ , (i)-(l)  $\delta_{pn}^1$  y (m)-(p)  $\delta_{pn}^0$  del Ti. La escala de colores del panel (d) se ha fijado entre -1 y -0.5 para poder visualizar mejor las curvas de nivel.

tan las correlaciones  $nn$  del  $^{48}\text{Ca}$ , este comportamiento se atenúa, siendo apreciables las variaciones para amplitudes  $\delta_{pn,f}^0$  cada vez mayores. En efecto, para  $\delta_{nn,i} \approx 4$ , el término de Fermi se mantiene en torno a -0.95 independientemente de grado de apareamiento isoescalar del estado final.

Por otro lado, el término de Gamow-Teller presenta un comportamiento similar al de Fermi en los casos en los que se explora el apareamiento  $pp$  y  $nn$  –paneles (e) y (f)– en el estado final. En ambos casos además, hay una dependencia, prácticamente lineal entre el apareamiento de ambos estados y el elemento de matriz, obteniendo valores superiores según se avanza en ambas amplitudes. Sin embargo, se observa que la inclusión de los dos tipos de apareamiento produce resultados notablemente superiores. Además, resulta sorprendente –como ya anticipaba el panel (j) de la Fig. 6.16– que este elemento de matriz es prácticamente independiente de las correlaciones  $pn$  con  $T = 1$  (ver panel (g)). En cuanto al canal isoescalar, como también se anticipaba, un mayor valor en  $\delta_{pn,f}^0$  se traduce en una suave disminución en el término GT. Sin embargo, este efecto queda atenuado cuando el núcleo inicial presenta una energía de apareamiento notablemente alta.

Siguiendo con el elemento de matriz tensorial, se observa que es el que presenta mayor simetría en las superficies, pasando de valores en torno a  $M_T \approx 0.15$  para estados con poco apareamiento en el par de canales final e inicial hasta reducirse casi a cero en el extremo del plano. Este comportamiento, sin embargo, cambia en el caso de explorar  $\delta_{nm,f}$ , donde surge una amplia región  $\delta_{nm,f} > \delta_{nm,i}$  con valores próximos al máximo encontrado en todos los casos, esto es, 0.15. Esto se debe a que aumentar la amplitud  $nn$  en el Ca tiende a disminuir el valor de  $M_T$ , mientras que en el Ti, produce el efecto contrario, aunque de modo más tenue.

Por último, el elemento de matriz nuclear total, presenta un comportamiento similar en los paneles (m), (n) y (o), viéndose potenciado en los extremos altamente correlacionados de las tres superficies. Además, se confirma de nuevo que la formación de pares isoescalares reduce notablemente su valor. En efecto, en el panel (p) encontramos una amplia región –en la que hay escaso apareamiento  $nn$  en el Ca– donde  $M^{0\nu}$  se reduce hasta (prácticamente) ser nulo para  $\delta_{pn,f}^0 \approx 3$ . En el caso de incrementar el apareamiento de los estados iniciales, este descenso también es más perceptible, de tal modo que, el máximo valor se encuentra sobre el eje horizontal en el punto  $\delta_{nm,i} \approx 4$ , siendo ligeramente superior a 2.

Con todo lo expuesto, teniendo en cuenta la suavidad de las superficies que nos hemos encontrado, parece más que razonable realizar la mezcla de estados PGCM utilizando como coordenadas generadoras los grados de libertad estudiados. Así,



utilizando la misma estrategia que con el parámetro de deformación  $\beta_2$ , los valores medios de los elementos de matriz entre funciones de onda colectivas final e inicial quedan resumidos en el Cuadro 6.4.

PGCM( $\delta_f$ )	$M_F$	$M_{GT}$	$M_T$	$M^{0\nu}$	$E_{0+}({}^{48}\text{Ti})$ [MeV]	$E_{0+}({}^{48}\text{Ca})$ [MeV]
$\delta_{pp}$	-0.46	1.88	0.061	1.49	-21.59	
$\delta_{nn}$	-0.48	2.05	0.087	1.66	-21.63	-7.20
$\delta_{pn}^1$	-0.08	2.52	0.091	2.53	-21.32	
$\delta_{pn}^0$	-0.56	1.10	0.091	0.62	-21.68	

Cuadro 6.4: Valores medios GCM de los elementos de matriz nucleares de la transición  $0\nu\beta\beta$  del  ${}^{48}\text{Ca}$  al  ${}^{48}\text{Ti}$  explorando las distintas amplitudes de apareamiento  $\delta_f$  del Ti, junto con las energías del estado fundamental del Ti y Ca obtenidas con los distintos esquemas variacionales.

A modo de conclusión, una vez más encontramos el mismo comportamiento para las distintas correlaciones de apareamiento exploradas. En efecto, por un lado, tomando como coordenadas las amplitudes de apareamiento  $pp$  y  $nn$  obtenemos resultados similares a los obtenidos explorando en deformaciones axiales sin incluir la mezcla  $pn$ . Este hecho era esperable dado que la propia variación en el parámetro  $\beta_2$  implica implícitamente variar el contenidos de pares de este tipo, tanto en el  ${}^{48}\text{Ca}$  como en el  ${}^{48}\text{Ti}$ <sup>8</sup>.

Por otro lado, vemos que la mezcla de estados con distinto  $pn$  isovectorial aumenta considerablemente el elemento de matriz  $M^{0\nu}$ , debido a la reducción en el término de Fermi y aumento simultáneo de Gamow-Teller. Este hecho nos lleva a pensar que es necesario un tratamiento más riguroso en las funciones de onda proyectadas. En efecto, dada la estructura de este operador, es conocido que el solape entre funciones de onda que satisfacen buen isospín reducen su valor medio[160, 161], por lo que será necesario en un futuro considerar la proyección a este número cuántico.

Por último, se ha encontrado que el esquema variacional con los pares isoescalares presenta el elemento de matriz total más bajo de todos, viéndose reducido en más de un factor 2 respecto del resto de resultados. Este hecho resulta más interesante aún

<sup>8</sup>Según nos alejamos del estado esférico, las correlaciones de apareamiento disminuyen suavemente hasta desaparecer, cayendo en estados de tipo determinante de Slater para deformaciones extremas. Este hecho, no obstante, es más habitual cuando resuelven las ecuaciones HFB.

teniendo en cuenta que las energías del estado fundamental del  $^{48}\text{Ti}$  se describen de modo similar cuando se explora cualquiera de los dos canales de apareamiento  $pn$ , mostrando de nuevo que los elementos de matriz nucleares son más sensibles a las características de las funciones de onda que la energía.

### 6.4.2. Generalización a desintegraciones $^A\text{Ca} \rightarrow ^A\text{Ti}$

El objetivo ahora es emplear el esquema completo PGCM en los grados de libertad de apareamiento anteriores para un mayor número de transiciones partiendo de distintos isótopos de Ca, de modo similar a la referencia [144]. En nuestro caso se emplea la interacción efectiva KB3G, aunque la forma en la que se incluyen correlaciones es mediante la exploración explícita de las amplitudes de apareamiento  $\delta$ . En comparación con el apartado anterior, ahora dichos estados se obtendrán minimizando la energía proyectada a buen número de partículas. Si bien las superficies de energía no son tan suaves y las energías de apareamiento presentan ciertas discontinuidades, dado que se realizará la mezcla completa de estados, podemos despreciar estos efectos. Para este análisis se han empleado los siguientes cálculos PGCM:

1. *sph*: Solo se incluyen los estados esféricos del Ca y Ti. Esta aproximación sería análoga a los cálculos SM en los que no se rompen pares de partículas (*seniority* 0).
2. PGCM<sub>1</sub>: Se obtienen funciones de onda colectivas cuya coordenada generadora es el parámetro de deformación axial  $\beta_2$ . No se imponen ligaduras a los canales  $pp$  y  $nn$  y, dado que no se permite la mezcla de protones y neutrones, tampoco a los canales  $pn$ .
3. PGCM<sub>2</sub>: Se obtienen funciones de onda colectivas explorando explícitamente  $(\delta_{pn}^1, \beta_2)$  en los estados intrínsecos del Ti. No se han impuesto ligaduras en los canales  $pp$  y  $nn$ , por lo que la amplitud en estos canales, de nuevo varía.
4. PGCM<sub>3</sub>: Similar al esquema anterior, salvo que ahora se explora  $(\delta_{pn}^0, \beta_2)$  en el caso del Ti.

Además, en los dos últimos generadores, la función de ondas colectiva del Ca se ha generado con una malla de estados intrínsecos con ligaduras en diferentes valores

medios en deformaciones axiales y apareamiento  $nn$ , para que sea descrito de la forma más exacta posible. En cuanto a los grados de libertad de apareamiento  $pp$  y  $nn$  del Ti, la exploración en deformaciones ya varía el contenido de este tipo de pares, por lo que se omite el cálculo PGCM explorando este tipo de correlaciones. También es posible que surja triaxialidad en estos cálculos, aunque el grado de libertad  $\gamma$  no se explora explícitamente. Los resultados, para los distintos elementos de matriz  $M_F^{0\nu}$  y  $M_{GT}^{0\nu}$ , se muestran en la Fig. 6.18.

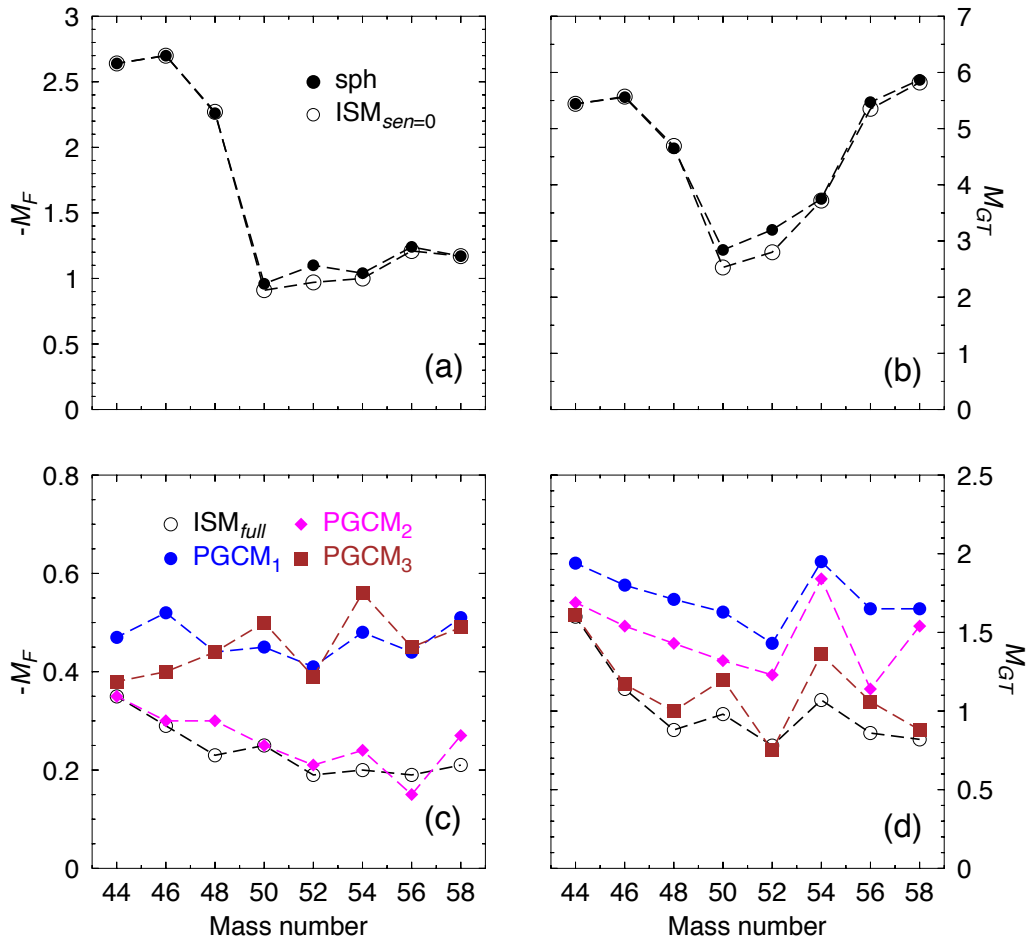


Figura 6.18: Elementos de matriz  $-M_F^{0\nu}$  y  $M_{GT}^{0\nu}$  para las desintegraciones  $\text{Ca} \rightarrow \text{Ti}$  con distinto  $A$  empleando diferentes esquemas variacionales junto con el resultado ISM *seniority* 0 (paneles superiores) y completo (paneles inferiores) con la interacción KB3G.

De modo similar a la comparación de los resultados exactos con los obtenidos con la interacción de Gogny usando los métodos PGCM<sub>1</sub> y PGCM<sub>2</sub>[145], en los paneles (a) y (b) se muestran los resultados obtenidos con las funciones de onda esféricas junto con los resultados del modelo de capas en los que no se rompen pares de partículas, mientras que en los paneles (c) y (d) se muestran los resultados PGCM junto con los del modelo de capas completo.

En cuanto a la primera comparación, vemos que la aproximación variacional esférica describe en muy buen acuerdo, tanto cualitativo como cuantitativo, la variación de los elementos de matriz de Fermi y Gamow-Teller calculados con la diagonalización exacta usando una base de determinantes de Slater sin ruptura de pares. En efecto, como se pudo ver en las Fig. 6.7 y 6.10, la exploración explícita de las amplitudes de apareamiento permite la descripción de configuraciones con ruptura de pares, por lo que al tomar un único estado intrínseco esférico, las correlaciones asociadas a esta ruptura no están presentes.

Al sofisticar más la aproximación variacional explorando  $\beta_2$  (PGCM<sub>1</sub>), se observa una gran reducción en los elementos de matriz en comparación con el cálculo esférico, reduciendo dichas cantidades en un orden de magnitud para el término de Fermi y hasta en un factor 3 en el de Gamow-Teller para el caso  $A = 56$ . En efecto, la mezcla entre estados de diferentes deformaciones se esperaba que redujera la probabilidad de transición, además, la función de onda colectiva de los isótopos de Ti, permite incluir correlaciones debidas a la fluctuación de formas[162]. En cuanto a los esquemas PGCM<sub>2</sub> y PGCM<sub>3</sub>, se observa que describen en mayor grado los elementos de matriz de Fermi y Gamow-Teller, respectivamente: mientras que la inclusión de pares  $pn$  isovectoriales produce resultados muy cercanos al  $M_F^{0\nu}$  exacto, los pares isoescalares describen mejor el  $M_{GT}^{0\nu}$ . Este hecho, por tanto, nos lleva a la necesidad de construir un último conjunto de estados intrínsecos que explore simultáneamente ambos grados de libertad.

Para cerciorarnos de que lo expuesto hasta ahora es fruto de la propia naturaleza de las correlaciones incluidas, se analiza la bondad de las diferentes aproximaciones variacionales tomando como criterio la descripción de los estados  $0_1^+$  de ambos núcleos. Así, en la Fig. 6.19 se muestra la diferencia entre la energía PGCM y SM para cada isótopo de Ca y Ti, teniendo en cuenta la diagonalización con funciones

de onda sin ruptura de pares y la completa.

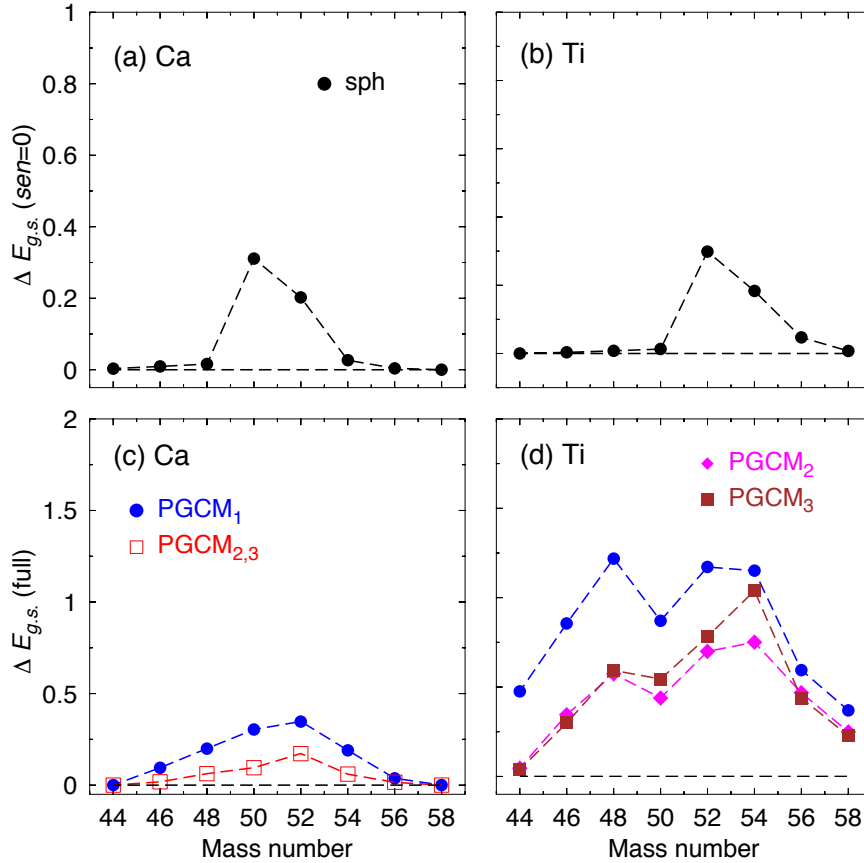


Figura 6.19: Diferencia de energías del estado fundamental respecto del cálculo exacto (columna izquierda) para el Ca y Ti. En el caso del Ca, PGCM<sub>2,3</sub> indica el generador en  $\beta_2, \delta_{nn}$ . La referencia en la escala es la energía exacta obtenida con la diagonalización con estados sin ruptura de pares (paneles superiores) y completa (paneles inferiores).

En lo referido al esquema con *seniority* 0, los resultados variacionales son considerablemente buenos en la mayoría de casos en esta cadena. Si bien, para los núcleos a mitad de capa, la diferencia de energías es de aproximadamente 300 keV, casos donde tienen lugar las mayores diferencias en los elementos de matriz de Fermi y Gamow-Teller.

En cuanto a la comparación con la diagonalización completa para el Ca, cuan-

do se explora conjuntamente deformaciones y apareamiento  $nn$ , la diferencia con la energía exacta no llega a alcanzar los 200 keV. En el caso del Ti, cuando se incluyen las correlaciones  $pn$  en ambos canales vemos que la ganancia es ligeramente superior para los isótopos más ligeros. Sin embargo, comparando estos dos últimos cálculos, la diferencia entre ellos es del orden de decenas de keV. De este modo vemos que la inclusión y exploración de las correlaciones de apareamiento  $pn$  influyen significativamente en la obtención del elemento de matriz nuclear total, independientemente de la capacidad de estas coordenadas de describir la estructura de los núcleos involucrados.

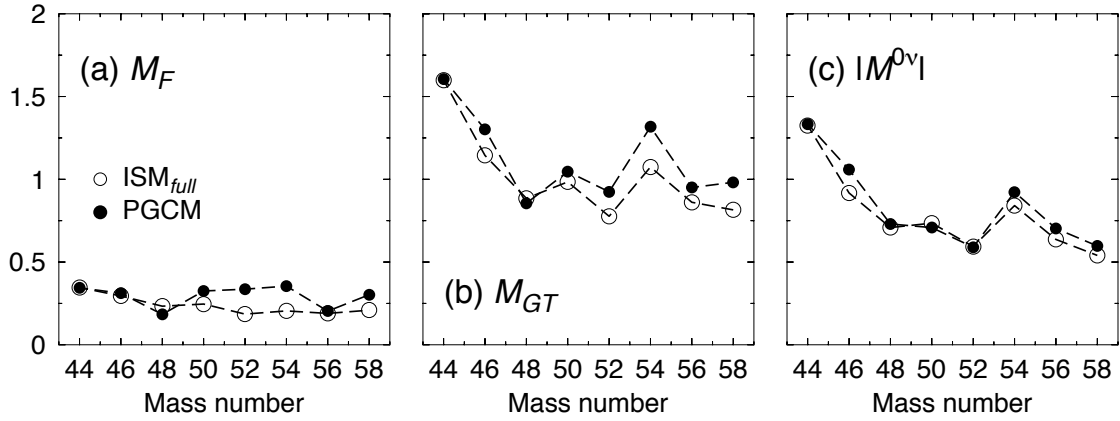


Figura 6.20: Diferencia de energías del estado fundamental respecto del cálculo exacto (columna izquierda) para el Ca y Ti. En el caso del Ca, PGCM<sub>2,3</sub> indica el generador en  $\beta_2, \delta_{nn}$ . La referencia en la escala es la energía exacta obtenida con la diagonalización con estados sin ruptura de pares (paneles superiores) y completa (paneles inferiores).

Dados los resultados mostrados 6.18, y viendo la necesidad de incluir conjuntamente los dos tipos de pares  $pn$ , se ha calculado un último generador donde la función de onda colectiva de los Ti es mezcla de todos los estados intrínsecos de los esquemas anteriores. Así, en la Fig. 6.20 se muestran los elementos de matriz de Fermi, Gamow-Teller variacionales con este último cálculo PGCM, junto con los valores exactos. En relación con el término de Fermi, vemos que para los núcleos a mitad de capa, las diferencias son ligeramente superiores al esquema PGCM<sub>2</sub>. Esto, en efecto, es debido a la inclusión de las correlaciones de apareamiento isoescalares. En segundo lugar, cabe destacar que, pese a las diferencias encontradas en los

elementos de matriz de Fermi y Gamow-Teller, el elemento de matriz nuclear total presenta menores desviaciones. Este hecho, sin embargo, no debe considerarse como un logro del método, ya que se atribuye a la sobreestimación en el término de Fermi, que disminuye el elemento de matriz total.

En cuanto a las energías del estado fundamental, los resultados con este último esquema se encuentran por debajo de cualquiera de los cálculos anteriores, si bien la ganancia es pequeña, por lo que no se muestran. En cualquier caso, se ha visto que las correlaciones de apareamiento pueden considerarse buenas coordenadas generadoras del método PGCM, de tal modo que, con un conjunto pequeño de funciones de onda –entre 20 y 30 estados– se pueden describir tanto los estados fundamentales como los elementos de matriz nucleares de la desintegración  $0\nu\beta\beta$ . Además, para una mejor descripción de estas transiciones, deben considerarse simultáneamente todos los posibles canales de apareamiento. No obstante, se espera que para núcleos más pesados, con mayor número de nucleones de valencia, sea necesario la sofisticación de la malla de estados intrínsecos, incluyendo –entre otros– la exploración explícita del plano de deformaciones  $(\beta_2, \gamma)$ .

---

## Capítulo 7

# Conclusiones y perspectivas de trabajo futuro

Aunque los métodos de campo medio y más allá de este han sido puestos a prueba en –a día de hoy– innumerables ocasiones, este trabajo de investigación ha presentado una serie de novedades que se pueden resumir del siguiente modo.

Por un lado, dada la diversidad de técnicas y, por tanto, de códigos de estructura nuclear basados en la teoría expuesta en el Capítulo 3, se veía conveniente crear una suite que englobara las principales técnicas exploradas. Así, el reciente código publicado, TAURUS\_vap no es más que el punto de partida para métodos más sofisticados como el PGCM. Este código, entre otras ventajas, podría destacarse por tres aspectos.

En primer lugar, está escrito en Fortran 2003, un lenguaje de programación con estándares modernos lo que permite una revisión e implementación de rutinas más eficientes en el futuro de modo sencillo y más claro. Además, el uso de compiladores como ifort permite un mayor rendimiento gracias a las librerías de álgebra lineal BLAS y LAPACK. En segundo lugar, tal y como está escrito, se pueden gran variedad interacciones, tales como las interacciones efectivas propias de cálculos de modelo de capas o las obtenidas con métodos *ab initio* en los que no se introduce el concepto de *core* inerte. Por último, y en tercer lugar, dada la relevancia de las simetrías autoconsistentes de las semillas del cálculo HFB/PNVAP, resulta novedoso un código en el que se permita elegir entre gran variedad de funciones de onda iniciales. Si bien



en este trabajo solo se han utilizado unos pocos, la versión publicada del código permite elegir entre hasta nueve tipos diferentes, según se quiera (o no) preservar simetrías tales como la rotacional, número de partículas, paridad, etc.

Otra novedad importante surge precisamente de la bondad de este código. Como se ha podido ver, nos encontramos por primera vez una misma herramienta computacional que permite tratar con la misma efectividad núcleos tanto par-par, como par-impar e impar-impar. Esto es, además, gracias a las semillas que permiten la mezcla  $pn$  conjuntamente con el método del bloqueo. La bondad de estas aproximaciones y la relevancia de los distintos grados de libertad, empleados como coordenadas generadoras, han quedado más que justificadas a lo largo de los Capítulos 4, 5 y 6 donde se han espectros de bajas energías, observables de naturaleza espectrocópica ( $BE2$ ,  $BM1$ , etc.) e incluso elementos de matriz nucleares de procesos más complicados, como las desintegraciones  $\beta$  y  $\beta$  doble sin neutrinos.

Dicho esto, y a la luz de la colección de resultados mostrados en el desarrollo de los capítulos anteriores, cabe destacar tres conclusiones generales:

1. En el Capítulo 4 se presentaba el método PGCM y se aplicaba a tres casos que servían como ejemplos de núcleos de masa par-par, par-impar e impar-impar. De lo expuesto en dicho capítulo vemos que cualquiera de los tres ejemplos puede ser descrito con el mismo grado de exactitud (en nuestro caso, desviación respecto de la solución exacta SM). En el caso de los sistemas par-impar e impar-impar, se ve muy conveniente la ruptura de la simetría axial para que el estado intrínseco HFB/PNVAP sea independiente del nivel bloqueado (o niveles, en el último de los casos). En el caso de preservar la simetría axial, es conveniente incluir diversas funciones de onda bloqueadas en distintos niveles para poder aproximarnos a los distintos estados excitados. Esto además, permite con unos pocos estados, describir los espectros de bajas energías *grosso modo*. Sin embargo, la deformación triaxial en la mayoría de los casos toma un papel casi principal, por lo que no se incluyen suficientes correlaciones. Para el caso impar-impar, se ha visto de crucial importancia la mezcla  $pn$  para que la paridad global del sistema sea la correcta, sin embargo, el colapso en el límite de apareamiento cero en el cálculo HFB dificulta drásticamente el problema.
2. En cuanto a los grados de libertad habituales, se ha puesto a prueba cada una

de ellas, realizando una comparativa con la solución exacta dada por el cálculo del modelo de capas. En el caso de explorar las amplitudes de apareamiento  $\delta$  se ha visto que son una verdadera manera de variar en contenido en correlaciones de apareamiento de las funciones de onda de muchos cuerpos. Así, gracias al método PGCM, se ha podido analizar cómo de relevantes son cada uno de los canales de apareamiento. Se ha visto que en núcleos muy ligeros, una somera malla de puntos con diferentes deformaciones bastaba para incluso alcanzar las energías exactas, sin embargo, para núcleos a mitad de capa y con masas algo mayores, la inclusión de todos los canales posibles permitía una ganancia de energía significativa. Aún con esto, el tamaño de los espacios de valencia tratados era un factor determinante. En efecto, para espacios relativamente pequeños –tales como el de la interacción USD o KB3G, que solo incluyen tres o cuatro órbitas respectivamente– resultó ser más efectivo buscar un mayor grado de independencia lineal entre los estados intrínsecos proyectados que dar con los grados de libertad relevantes.

3. Centrándonos en las correlaciones de apareamiento protón-neutrón, no se ha visto una predilección clara de un canal u otro en los distintos casos estudiados en términos de espectros de energía o transiciones  $\beta$ . Así, en los casos  $N \approx Z$  no se ha encontrado que el canal isoescalar tenga un papel más relevante que el isovectorial, si bien, como ya se ha dicho, esto puede deberse al efecto del tamaño de los espacios de valencia empleados. Las únicas diferencias remarcables han sido encontradas en el cálculo de los elementos de matriz nucleares de la transición  $0\nu\beta\beta$  a lo largo de las distintas transiciones  $\text{Ca} \rightarrow \text{Ti}$  expuestas, donde se ha visto que las correlaciones isoescalares disminuyen claramente la probabilidad de esta transición. En cualquier caso, estos canales son de gran importancia para describir convenientemente cualquier núcleo.

Por último, a lo largo de este periodo de investigación se han abierto varios campos de mejora y líneas de investigación que podrán tratarse en un futuro próximo. En cuanto a la mejora del código TAURUS, se podrían destacar los siguientes puntos:

1. Inclusión de la mezcla de muchas cuasipartículas para la resolución de las ecuaciones PGCM, lo que permitiría una mejora en las descripciones de esta-

- dos excitados. Se espera, además, que esto tenga un impacto considerable en núcleos impares o impar-impar. Esto, además, permitiría una comparativa más completa de los elementos de matriz nucleares en transiciones  $\beta$  y  $0\nu\beta\beta$ .
2. Implementación de la dispersión del hamiltoniano, esto es  $\Delta E = \sqrt{\langle \hat{H}^2 \rangle - \langle \hat{H} \rangle^2}$ , lo que permitiría conocer, de antemano, lo alejado que nos encontramos de la solución exacta con los estados intrínsecos obtenidos vía HFB/PNVAP y PGCM.
  3. Implementación de la ligadura de ortogonalidad cuando se bloquean más de un nivel del espacio de configuración. Esto, como ya se ha expuesto anteriormente, será de vital importancia para la descripción a nivel HFB de los núcleos impar-impar.
  4. Implementación de amplitudes de apareamiento isoescalares con  $J > 1$ . Dado el extraño comportamiento que se ha observado al explorar  $\delta_{pn}^0$ , es posible que en el medio nuclear se puedan formar pares acoplados a un momento angular mayor (impar, dada la antisimetría de la función de ondas de dos cuerpos).
  5. Implementación de la proyección a momento angular previa a la variación. Si bien es conocido que el coste computacional es mucho mayor en comparación con la simple proyección a buen número de partículas, la paralelización del programa –vía MPI u openMP– aligeraría el tiempo de cálculo.
  6. Unificación, depuración y publicación del código TAURUS\_pav, esto es, el encargado de la proyección después de la variación. A lo largo de estos años, el programa original se ha ido modificando para permitir el cálculo de los elementos de matriz de las desintegraciones  $\beta$ ,  $0\nu\beta\beta$ , números de ocupación y otros valores medios entre estados proyectados, lo que ha derivado en varios códigos similares. Actualmente se está englobando todas estas variantes en un único programa, simplificando y adaptando el lenguaje al estándar de 2008. Junto a esto, también se ve conveniente la implementación de la proyección a buen isoespín.
  7. Unificación, depuración y publicación de los códigos que resuelven la ecuación HWG, junto con el cálculo de valores medios de operadores entre funciones de

onda PGCM. De igual modo que en el código PAV, a día de hoy hay una gran diversificación en estos dos programas.

Una vez refinados los distintos códigos, también se pueden destacar las líneas de investigación, que surgen precisamente de los problemas encontrados en el desarrollo de esta memoria de tesis.

1. Mejora de la descripción de los estados con  $J$  entero e impar. Como se ha podido ver, con las herramientas empleadas en este trabajo la descripción de estos estados era mucho más pobre en comparación con sus análogos pares. Así, es conveniente explorar las correlaciones que surgen fruto de variar la frecuencia de la rotación a través de la ligadura  $\omega \langle \hat{J}_x \rangle$ . Esto es, en definitiva, un análisis exhaustivo del método de *cranking*.
2. Tratamiento correcto de las soluciones espurias fruto del movimiento del centro de masas. Dado que este trabajo no se ha trabajado con espacios de valencia que mezclen paridad, no se ha podido mostrar esta problemática. Sin embargo, al trabajar con interacciones que incluyan un mayor número de capas, es habitual encontrarnos estados  $1^-$  cuyas energías se encuentran muy cerca del estado fundamental. Dicho estado, se atribuye a la ruptura y no restauración de la simetría traslacional del hamiltoniano[163, 164]. La correcta descripción de los espectros rotacional pasa, por tanto, por la eliminación de dichos estados. A día de hoy, TAURUS puede dar solución a este problema.
3. Descripción de problemas asociados a la simetría de isoespín, tales que el estudio de bandas isorotacionales y estados isobáricos análogos, esto es, estados con un mismo  $T$  y  $J^\pi$  dentro una cadena isobárica. Se espera que estos últimos tengan un impacto en el conocimiento de esta simetría y la misma interacción entre nucleones. Aunque hay multitud de artículos que abordan el problema desde un punto de vista experimental y teórico[165–167], hay poco escrito con métodos más allá de campo medio. Evidentemente, es necesario el desarrollo de un código eficiente que permita la proyección a los distintos números cuánticos sin un excesivo coste computacional. En este marco también se incluye un análisis más exhaustivo en los elementos de matriz nucleares de las desintegraciones  $\beta$  doble sin neutrinos.

4. En cuanto a la ecuación de HWG, se ve necesario una profundización en los criterios de convergencia y un análisis de la ortogonalidad de los estados intrínsecos. Como se ha podido ver, en espacios de valencia reducidos, basta con incluir un número suficiente de estados linealmente independientes para que la descripción variacional sea aceptable. Sin embargo, es posible que se pueda reducir el número de autoestados del hamiltoniano en la base natural sin perder (demasiada) exactitud, lo que se traduce en la construcción de una malla de estados más pequeña. Aunque esto pueda ser realmente un problema matemático y no físico, tendrá un gran impacto en el tiempo de cálculo y en la búsqueda de los grados de libertad más relevantes para los sistemas de muchos cuerpos, por tanto, no solo en la estructura nuclear.

Como puede verse, las herramientas y métodos expuestos en este trabajo, permitirán profundizar en problemas que, a día de hoy, siguen abiertos (solo se han mencionado unos pocos). Por tanto, este trabajo no ha tenido pretensión alguna de ser un final, sino todo lo contrario. TAURUS es el comienzo de una nueva época para las aproximaciones MF y BMF.

---

# Apéndice A

## Probabilidades de transición electromagnéticas

### A.1. Definiciones

Las probabilidades de transición EM vienen dadas por[16]:

$$B(E\lambda, J_i \rightarrow J_f) = \frac{1}{2J_i + 1} |\langle J_f || \hat{Q}_\lambda || J_i \rangle|^2 \quad (\text{A.1})$$

$$B(M\lambda, J_i \rightarrow J_f) = \frac{1}{2J_i + 1} |\langle J_f || \hat{M}_\lambda || J_i \rangle|^2 \quad (\text{A.2})$$

donde no estamos considerando las distintas bandas  $\sigma$ , pues vamos a desarrollar las expresiones para estados proyectados a buen momento angular. Para hallar los elementos de matriz reducidos emplearemos el teorema de Wigner-Eckart con los solapes de dichos operadores, cuyas expresiones son:

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = r^\lambda Y_{\lambda\mu} \quad (\text{A.3})$$

$$\hat{M}_{\lambda\mu} = \left( g_s \vec{S} + \frac{2}{\lambda + 1} g_l \vec{L} \right) \vec{\nabla} r^\lambda Y_{\lambda\mu} \quad (\text{A.4})$$

siendo  $g_l$  el factor  $g$  orbital– y  $g_s$  el factor giromagnético  $g$  de espín– cuyos valores son[102]:

$$g_{l,\pi} = 1, \quad g_{s,\pi} = 5.586 \quad (\text{A.5a})$$

$$g_{l,\nu} = 0, \quad g_{s,\nu} = -3.826 \quad (\text{A.5b})$$

Además, el operador multipolar magnético se deja en función del magnetón nuclear  $\mu_N$  y el multipolar eléctrico en función de la carga eléctrica del electrón en valor absoluto. En el último de estos dos, a la hora de obtener los valores medios entre funciones de onda PGCM se tomarán las cargas efectivas  $e_\pi = 1.5$  y  $e_\nu = 1.0$  para protones y neutrones respectivamente.

Como se ve en las expresiones anteriores, nos encontramos con operadores tensoriales de rango  $\lambda$  bajo rotaciones, por lo que a la hora de hallar los solapes, tendremos que tener en cuenta cómo se transforman bajo esta operación. Sin embargo, para la parte de la proyección a buen número de partículas, estos operadores se comportan como escalares. Si denotamos por  $\hat{O}_{\lambda\mu}$  al operador genérico que engloba a ambos, se cumplen las siguientes propiedades:

$$\hat{R}(\Omega)\hat{O}_{\lambda\mu}\hat{R}^\dagger(\Omega) = \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{\mu'\mu}^\lambda(\Omega)\hat{O}_{\lambda\mu'} \quad (\text{A.6})$$

Además, bajo la transformación de paridad se satisface

$$\hat{\Pi}\hat{Q}_{\lambda\mu}\hat{\Pi}^\dagger = (-1)^\lambda\hat{Q}_{\lambda\mu} \quad (\text{A.7a})$$

$$\hat{\Pi}\hat{M}_{\lambda\mu}\hat{\Pi}^\dagger = (-1)^{\lambda+1}\hat{M}_{\lambda\mu} \quad (\text{A.7b})$$

## A.2. Cálculo explícito del solape entre estados proyectados

Empecemos con el operador multipolar eléctrico. El solape entre estados proyectados a paridad, momento angular y número de partículas vendrá dado por

$$\mathcal{Q}_{\lambda\mu}^{J_1 J_2 \pi_1 \pi_2, NZ}(q, q') = \sum_{K_1 K_2} a_{K_1}^{J_1^*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') \langle \phi(q) | \hat{P}^{\pi_1} \hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{Q}_{\lambda\mu} \hat{P}_{M_2 K_2}^{J_2} \hat{P}^{\pi_2} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle \quad (\text{A.8})$$

por lo que, para poder emplear el formalismo habitual, tendremos que desplazar el proyector  $\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1}$  hacia la derecha. Teniendo en cuenta que

$$\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{Q}_{\lambda\mu} = \frac{2J_1 + 1}{8\pi^2} \int_{\Omega} \mathcal{D}_{K_1 M_1}^{J_1^*}(\Omega) \hat{R}(\Omega) \hat{Q}_{\lambda\mu} d\Omega \quad (\text{A.9})$$

podemos introducir  $\hat{R}^\dagger \hat{R}$  por la derecha y emplear la propiedad (A.6), tal que

$$\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{Q}_{\lambda\mu} = \frac{2J_1 + 1}{8\pi^2} \int_{\Omega} \sum_{\mu'} \mathcal{D}_{K_1 M_1}^{J_1^*} \mathcal{D}_{\mu'\mu}^{\lambda}(\Omega) \hat{Q}_{\lambda\mu'} d\Omega \quad (\text{A.10})$$

así, podemos utilizar las dos siguientes propiedades de las matrices de Wigner

$$\mathcal{D}_{\mu'\mu}^{\lambda}(\Omega) = (-1)^{\mu-\mu'} \mathcal{D}_{-\mu'-\mu}^{\lambda^*}(\Omega) \quad (\text{A.11})$$

$$\mathcal{D}_{K_1 M_1}^{J_1}(\Omega) \mathcal{D}_{\mu'\mu}^{\lambda}(\Omega) = \sum_{JMK} \langle J_1 K_1 \lambda - \mu' | JM \rangle \langle J_1 M_1 \lambda - \mu | JK \rangle \mathcal{D}_{MK}^J(\Omega) \quad (\text{A.12})$$

donde  $J = |J_1 - \lambda|, \dots, J_1 + \lambda$ ,  $M = K_1 - \mu', \dots, K_1 + \mu'$  y  $K = M_1 - \mu, \dots, M_1 + \mu$ . Además, teniendo en cuenta las siguientes propiedades de los coeficientes Clebsch-Gordan,

$$\langle abcd | ef \rangle = (-1)^{a+c-e} \langle cdab | ef \rangle \quad (\text{A.13})$$

$$\langle abcd | ef \rangle = (-1)^{a-b} \sqrt{\frac{2e+1}{2c+1}} \langle efa - b | cd \rangle \quad (\text{A.14})$$



entonces, se puede llegar a que

$$\hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{Q}_{\lambda \mu} = \sum_{J M K \mu'} \langle J M \lambda \mu' | J_1 K_1 \rangle \langle J K \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle \hat{Q}_{\lambda \mu'} P_{M K}^J \quad (\text{A.15})$$

por tanto, utilizando ahora la propiedad (3.81b), entonces, la expresión (A.8) queda

$$\begin{aligned} \mathcal{Q}_{\lambda \mu}^{J_1 J_2 \pi_1 \pi_2, N Z}(q, q') &= \sum_{K_1 K_2} a_{K_1}^{J_1^*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') \cdot \\ &\cdot \sum_{M \mu'} \langle J_2 M \lambda \mu' | J_1 K_1 \rangle \langle J_2 M_2 \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle \langle \phi(q) | \hat{P}^{\pi_1} \hat{Q}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{M K_2}^{J_2} \hat{P}^{\pi_2} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

Ahora, utilizando la definición (3.82) y teniendo en cuenta que ambos estados pueden estar proyectados a distinta paridad, operando se puede llegar a

$$\begin{aligned} \langle \phi(q) | \hat{P}^{\pi_1} \hat{Q}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{M K_2}^{J_2} \hat{P}^{\pi_2} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle &= \frac{1}{4} (1 + \pi_1 \pi_2 (-1)^\lambda) \langle \phi(q) | \hat{Q}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{M K_2}^{J_2} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle \\ &+ \frac{1}{4} (\pi_2 + \pi_1 (-1)^\lambda) \langle \phi(q) | \hat{Q}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{M K_2}^{J_2} \hat{\Pi} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

donde se ha utilizado que  $\hat{\Pi}^2 = \mathbb{I}$ . Así, se ve que las transiciones E2, E4, ...  $-\lambda$  par-solo están permitidas cuando las paridades final e inicial ( $\pi_1$  y  $\pi_2$ ) son iguales, y de no ser así, los solapes anteriores se anulan; mientras que para las probabilidades de transición E1, E3, ..., las paridades final e inicial deben ser distintas.

Por último, el teorema de Wigner-Eckart nos permite obtener los elementos de matriz reducidos de dichos operadores entre estados proyectados

$$\langle J_1 || \hat{Q}_\lambda || J_2 \rangle = \frac{\sqrt{2J_1 + 1}}{\langle J_2 M_2 \lambda \mu | J_1 M_1 \rangle} \langle J_1 M_1 | \hat{Q}_{\lambda \mu} | J_2 M_2 \rangle \quad (\text{A.18})$$

por lo que llegamos a la expresión final que consta de los elementos necesarios para el cálculo ya presentados en apartados anteriores. Cambiando la notación levemente,

para indicar los estados final e inicial con sus respectivos números cuánticos

$$\begin{aligned} \langle \Phi^{\Gamma_f} || \hat{Q}_\lambda || \Phi^{\Gamma_i} \rangle &= \frac{\sqrt{2J_f + 1}}{4} \sum_{K_f K_i M \mu'} a_{K_f}^{J_f^*}(q) a_{K_i}^{J_i^*}(q') \langle J_i M \lambda \mu' | J_f K_f \rangle \cdot \\ &\left[ \alpha \langle \phi(q) | \hat{Q}_\lambda \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle + \beta \langle \phi(q) | \hat{Q}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{\Pi} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

siendo  $\alpha = (1 + \pi_f \pi_i (-1)^\lambda)$  y  $\beta = (\pi_i + \pi_f (-1)^\lambda)$ . Los dos solapes anteriores se obtienen del modo desarrollado en el Apéndice ??.

Para el operador multipolar magnético, teniendo en cuenta los resultados anteriores, se llega a que

$$\begin{aligned} \langle \Phi^{\Gamma_f} || \hat{M}_\lambda || \Phi^{\Gamma_i} \rangle &= \frac{\sqrt{2J_f + 1}}{4} \sum_{K_f K_i M \mu'} a_{K_f}^{J_f^*}(q) a_{K_i}^{J_i^*}(q') \langle J_i M \lambda \mu' | J_f K_f \rangle \cdot \\ &\left[ \alpha' \langle \phi(q) | \hat{M}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle + \beta' \langle \phi(q) | \hat{M}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{\Pi} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

siendo ahora  $\alpha' = (1 + \pi_f \pi_i (-1)^{\lambda+1})$  y  $\beta' = (\pi_i + \pi_f (-1)^{\lambda+1})$ , lo que impone la restricción de igualdad de paridades para las transiciones magnéticas impares, M1, M3,... y su desigualdad para las pares, M2, M4, etc.

Los solapes entre estados final e inicial que aparecen en las expresiones anteriores pueden ser calculados con la misma estrategia expuesta en el apéndice anterior. En efecto, dado que estamos trabajando con operador a un solo cuerpo, entonces,

$$\begin{aligned} \langle \phi(q) | \hat{O}_{\lambda \mu'} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle &= \frac{2J_i + 1}{8\pi^2} \frac{1}{L_Z L_N} \sum_{l_Z=1}^{L_Z} \sum_{l_N=1}^{L_N} e^{i\varphi_{l_N} N} e^{i\varphi_{l_Z} Z} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K} d\alpha \cdot \\ &\cdot \int_0^{2\pi} e^{i\gamma K'} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{MK_i}^{J_i^*}(\beta) \text{Tr} \left[ (\hat{O}_{\lambda \mu}) \rho^{10} \right] n(\Omega, \varphi_{l_N}, \varphi_{l_Z}, q, q') \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

donde  $(\hat{O}_{\lambda \mu})$  se refiere a los elementos de matriz, calculados en la siguiente sección. Además, incluyendo el operador de paridad,

$$\begin{aligned} \langle \phi(q) | \hat{O}_{\lambda\mu'} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{\Pi} \hat{P}^N \hat{P}^Z | \phi(q') \rangle &= \frac{2J_i + 1}{8\pi^2} \frac{1}{L_Z L_N} \sum_{l_Z=1}^{L_Z} \sum_{l_N=1}^{L_N} e^{i\varphi_{l_N} N} e^{i\varphi_{l_Z} Z} \int_0^{2\pi} e^{i\alpha K} d\alpha \cdot \\ &\cdot \int_0^{2\pi} e^{i\gamma K'} \int_0^\pi d\beta \sin \beta d_{MK_i}^{J_i*}(\beta) \text{Tr} \left[ (\hat{O}_{\lambda\mu}) \rho^{10} \right] n(\Omega, \pi, \varphi_{l_N}, \varphi_{l_Z}, q, q') \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

cuya diferencia reside en la construcción de la matriz densidad  $\rho^{10}$  y del solape de la norma.

### A.3. Elementos de matriz de los operadores multipolares

En la evaluación de los solapes anteriores es necesario considerar los operadores multipolares eléctricos y magnéticos en su expresión en segunda cuantización. De este modo, reescribiendo las expresiones (A.3) y (A.4) tenemos:

$$\hat{Q}_{\lambda\mu} = \sum_{ab} (\hat{Q}_{\lambda\mu})_{ab} c_a^\dagger c_b \quad (\text{A.23})$$

$$\hat{M}_{\lambda\mu} = \sum_{ab} (\hat{M}_{\lambda\mu})_{ab} c_a^\dagger c_b \quad (\text{A.24})$$

y, si se denotan ambos operadores indistintamente como  $\hat{O}_{\lambda\mu}$ , se necesitan por tanto los elementos de matriz

$$(\hat{O}_{\lambda\mu})_{ab} \equiv \langle a | \hat{O}_{\lambda\mu} | b \rangle \quad (\text{A.25})$$

siendo  $a$  y  $b$  estados del oscilador armónico tridimensional en la base acoplada, esto es,  $|nljm_j m_t\rangle^1$ .

---

<sup>1</sup>Se omite el número cuántico de isospín para no cargar en exceso las expresiones en esta sección. No obstante, se tendrá en cuenta la delta de Kronecker en  $m_t$  asociada al solape de los estados final e inicial.

### A.3.1. Operador multipolar eléctrico

Si bien en la literatura se pueden encontrar directamente los elementos de matriz reducidos en la base acoplada[102, 168–170], se desarrollan aquí las expresiones implementadas en la suite TAURUS.

Teniendo en cuenta la definición dada por (A.3), en primer lugar desacoplamos la base del oscilador

$$\langle n_a l_a j_a m_{j_a} | \hat{Q}_{\lambda\mu} | n_b l_b j_b m_{j_b} \rangle = \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} \langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \hat{Q}_{\lambda\mu} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle \cdot \\ C^{j_a m_{j_a}}_{l m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}} C^{j_b m_{j_b}}_{l m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}} \quad (\text{A.26})$$

donde  $C$  representa el coeficiente Clebsch-Gordan con el acoplamiento de los momentos angulares correspondientes<sup>2</sup>. Además, considerando que los estados final e inicial son estados del oscilador con dependencia en el espín es isoespín, y que el operador multipolar eléctrico no afecta a dicha parte de la función de ondas, la condición de ortogonalidad nos lleva a que el elemento de matriz anterior quede según la expresión siguiente:

$$\langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \hat{Q}_{\lambda\mu} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle = \langle n_a l_a m_{l_a} | \hat{Q}_{\lambda\mu} | n_b l_b m_{l_b} \rangle \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \quad (\text{A.27})$$

por lo que nos centramos que surge en el solape de la expresión (A.28). Considerando la parte radial y la angular de ambos estados y la definición del operador, entonces,

$$\langle n_a l_a m_{l_a} | \hat{Q}_{\lambda\mu} | n_b l_b m_{l_b} \rangle = \int_0^\infty R_{n_a l_a} r^\lambda R_{n_b l_b} dr \int_\Omega Y_{l_a m_{l_a}}^* Y_{\lambda\mu} Y_{l_b m_{l_b}} d\Omega \quad (\text{A.28})$$

En primer lugar, la parte angular puede ser resuelta mediante la integral de

---

<sup>2</sup>Si bien en el resto de esta memoria se utiliza una notación diferente, se ve conveniente utilizar una forma un poco más compacta.

Gaunt[171]

$$\int_{\Omega} Y_{l_a m_{l_a}}^* Y_{\lambda \mu} Y_{l_b m_{l_b}} d\Omega = (-1)^{m_{l_a}} \sqrt{\frac{(2l_a + 1)(2\lambda + 1)(2l_b + 1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_b \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_a & \lambda & l_b \\ -m_{l_a} & \mu & m_{l_b} \end{pmatrix} \quad (\text{A.29})$$

donde se ha utilizado la propiedad

$$Y_{l_a m_{l_a}}^* = (-1)^{m_{l_a}} Y_{l_a -m_{l_a}} \quad (\text{A.30})$$

y teniendo en cuenta las propiedades de simetría los símbolos 3-j y su relación con los coeficientes de Clebsch-Gordan[89], nos queda

$$\int_{\Omega} Y_{l_a m_{l_a}}^* Y_{\lambda \mu} Y_{l_b m_{l_b}} d\Omega = \sqrt{\frac{(2\lambda + 1)(2l_b + 1)}{4\pi(2l_a + 1)}} C_{\lambda 0 l_b 0}^{l_a 0} C_{\lambda \mu l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} \quad (\text{A.31})$$

En cuanto a la parte radial, pueden considerarse varias fuentes para el cálculo numérico de dicha parte. En el caso de la suite TAURUS, se han programado las expresiones glosadas en el capítulo 6 de la referencia [102], por lo que aquí bastará con dejar indicada dicha dependencia como  $\langle a|r^\lambda|b\rangle$ . Así, los elementos de matriz del operador multipolar eléctrico toman la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} (\hat{Q}_{\lambda\mu})_{ab} &= \langle a|r^\lambda|b\rangle \sqrt{\frac{(2\lambda + 1)(2l_b + 1)}{4\pi(2l_a + 1)}} \\ &\cdot \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{\lambda 0 l_b 0}^{l_a 0} C_{\lambda \mu l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} C_{l m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{l m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

y en el caso de trabajar con el operador cuadrupolar eléctrico, entonces simplemente

$$\begin{aligned} (\hat{Q}_{2\mu})_{ab} &= \langle a|r^2|b\rangle \sqrt{\frac{5(2l_b + 1)}{4\pi(2l_a + 1)}} \\ &\cdot \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{20 l_b 0}^{l_a 0} C_{2\mu l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} C_{l m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{l m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \end{aligned} \quad (\text{A.33})$$

### A.3.2. Operador multipolar magnético

Dada la definición (A.4), en primer lugar vamos a considerar el gradiente de la función radial y angular. Teniendo en cuenta que

$$\vec{\nabla}[r^\lambda Y_{\lambda\mu}] = \sqrt{\lambda(\lambda+1)} r^{\lambda-1} \sum_{m_\Lambda\sigma} C_{\Lambda m_\Lambda 1\sigma}^{\lambda\mu} Y_{\Lambda m_\Lambda} \quad (\text{A.34})$$

donde  $\Lambda = \lambda - 1$  y  $-\lambda \leq m_\Lambda \leq \lambda - 1$ . Así, los elementos de matriz de este operador vendrán dados por:

$$\langle a | \hat{M}_{\lambda\mu} | b \rangle = \sqrt{\lambda(\lambda+1)} \sum_{m_\Lambda\sigma} C_{\Lambda m_\Lambda 1\sigma}^{\lambda\mu} \left[ g_s \langle a | \vec{S} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | b \rangle + \frac{2}{\lambda+1} g_l \langle a | \vec{L} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | b \rangle \right] \quad (\text{A.35})$$

Por tanto, por simplicidad vamos a calcular de forma separada los elementos de matriz asociados a los operadores de espín y de momento angular orbital. En cualquier caso se consideran ambos operadores en la base esférica.

Para el primero de los dos anteriores, desacoplando la base y teniendo en cuenta la parte de isoespín, tenemos

$$\begin{aligned} \langle a | \vec{S} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | b \rangle = \\ \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{l m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{l m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \vec{S} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle \delta_{m_{t_a} m_{t_b}} \end{aligned} \quad (\text{A.36})$$

Así, teniendo en cuenta la separación de variables radial, angular y de espín, entonces:

$$\langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \vec{S} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle = \langle a | r^{\lambda-1} | b \rangle \int_{\Omega} Y_{l_a m_{l_a}}^* Y_{\Lambda m_\Lambda} Y_{l_b m_{l_b}} d\Omega \chi_{m_{s_a}}^\dagger \vec{S} \chi_{m_{s_b}} \quad (\text{A.37})$$

donde se ha tenido en cuenta la integral radial de modo similar al apartado anterior y la dependencia en la parte de espín 1/2 con las funciones  $\chi_{m_s}$ . Siguiendo la misma estrategia, la integral de Gaunt en función de los respectivos Clebsh-Gordan, tras

operar queda como

$$\begin{aligned} \langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \vec{S} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle &= \langle a | r^{\lambda-1} | b \rangle \sqrt{\frac{(2\lambda-1)(2l_b+1)}{4\pi(2l_a+1)}} \\ &\cdot C_{\Lambda 0 l_b 0}^{l_a 0} C_{\Lambda m_\Lambda l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} \chi_{m_{s_a}}^\dagger \vec{S} \chi_{m_{s_b}} \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

donde se ha tenido en cuenta la definición previa de  $\Lambda$ . Por último, los elementos de matriz de las componentes esféricas del operador de espín  $-\vec{S} = \hat{S}_\mu$  con  $\mu = \pm 1, 0$  entre las funciones de espín 1/2 vienen dados por

$$\chi_{m_{s_a}}^\dagger \hat{S}_\mu \chi_{m_{s_b}} = \sqrt{\frac{3}{4}} C_{\frac{1}{2} m_{s_a} 1 \mu}^{\frac{1}{2} m_{s_b}} \quad (\text{A.39})$$

De este modo, los elementos de matriz con el operador de espín quedan como

$$\begin{aligned} \langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \vec{S} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle &= \langle a | r^{\lambda-1} | b \rangle \sqrt{\frac{3}{4}} \sqrt{\frac{(2\lambda-1)(2l_b+1)}{4\pi(2l_a+1)}} \\ &\cdot C_{\Lambda 0 l_b 0}^{l_a 0} C_{\Lambda m_\Lambda l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} C_{\frac{1}{2} m_{s_a} 1 \mu}^{\frac{1}{2} m_{s_b}} \end{aligned} \quad (\text{A.40})$$

Continuamos ahora con la parte de momento angular orbital. Dado que dicho operador no afecta a la parte de espín e isoespín, la condición de ortogonalidad nos lleva, junto con el desacoplo correspondiente, a la siguiente expresión:

$$\begin{aligned} \langle a | \vec{L} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | b \rangle &= \\ \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{l m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{l m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \langle n_a l_a m_{l_a} | \vec{L} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | n_b l_b m_{l_b} \rangle \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \end{aligned} \quad (\text{A.41})$$

por lo que el solape anterior toma la misma forma que en los casos anteriores. Ahora bien, dado que tenemos el operador  $\vec{L}$  actuando sobre el armónico esférico  $Y_{\Lambda m_\Lambda}$ , tenemos que considerar que en la base esférica

$$\hat{L}_\mu Y_{\Lambda m_\Lambda} = \sqrt{\Lambda(\Lambda+1)} C_{\Lambda m_\Lambda 1\mu}^{\Lambda m_\Lambda + \mu} Y_{\Lambda, m_\Lambda + \mu} = \sqrt{\lambda(\lambda-1)} C_{\Lambda m_\Lambda 1\mu}^{\Lambda m_\Lambda + \mu} Y_{\Lambda, m_\Lambda + \mu} \quad (\text{A.42})$$

por lo que

$$\begin{aligned} \langle n_a l_a m_{l_a} | \vec{L} r^{\lambda-1} Y_{\Lambda m_\Lambda} | n_b l_b m_{l_b} \rangle = \\ \langle a | r^{\lambda-1} | b \rangle C_{\Lambda m_\Lambda 1\mu}^{\Lambda m_\Lambda + \mu} \sqrt{\frac{\lambda(\lambda-1)(2\lambda-1)(2l_b+1)}{4\pi(2l_a+1)}} C_{l_b 0 \Lambda 0}^{l_a 0} C_{l_b m_{l_b} \Lambda m_\Lambda + \mu}^{l_a m_{l_a}} \end{aligned} \quad (\text{A.43})$$

Por tanto, juntando todas las expresiones previamente calculadas y simplificando un poco, llegamos a la siguiente expresión general:

$$\begin{aligned} (\hat{M}_{\lambda\mu})_{ab} = \sqrt{\frac{\lambda(\lambda+1)(2\lambda-1)(2l_b+1)}{4\pi(2l_a+1)}} \sum_{\substack{m_\Lambda \sigma \\ m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{\Lambda m_\Lambda 1\sigma}^{\lambda\mu} C_{l m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{l m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \cdot \\ \cdot \langle a | r^{\lambda-1} | b \rangle C_{\Lambda 0 l_b 0}^{l_a 0} \left[ g_s \sqrt{\frac{3}{4}} C_{\Lambda m_\Lambda l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} C_{\frac{1}{2} m_{s_a} 1\mu}^{\frac{1}{2} m_{s_b}} + g_l \frac{2\sqrt{\lambda(\lambda-1)}}{\lambda+1} C_{\Lambda m_\Lambda 1\mu}^{\Lambda m_\Lambda + \mu} C_{\Lambda m_\Lambda + \mu l_b m_{l_b}}^{l_a m_{l_a}} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \right] \end{aligned} \quad (\text{A.44})$$

Si bien lo anterior presenta carácter general, aplicable a cualquier orden del multipolo, es conveniente desarrollar los elementos de matriz asociados al dipolo magnético.

En este caso, el gradiente de la parte radial y angular, ahora tomará el siguiente valor:

$$\vec{\nabla} r Y_{1\mu} = \sqrt{3} \sum_{\sigma} C_{001\sigma}^{1\mu} Y_{00} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \quad (\text{A.45})$$

y, continuando con la misma estrategia, puede llegarse a los siguientes elementos de matriz:



$$\begin{aligned}
(\hat{M}_{1\mu})_{ab} = & \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{lm_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{lm_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \delta_{n_a n_b} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{l_a l_b} \cdot \\
& \cdot \left[ \frac{3}{4} g_s C_{\frac{1}{2} m_{s_b} 1 \mu}^{\frac{1}{2} m_{s_a}} + g_l \sqrt{l_b(l_b + 1)} C_{l_b m_{l_b} 1 \mu}^{l m_{l_b} + \mu} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \delta_{m_{l_a} m_{l_b} + \mu} \right]
\end{aligned} \tag{A.46}$$

---

# Apéndice B

## Probabilidades de transición $\beta$

### B.1. Definiciones

Se definen los operadores de Fermi y de Gamow-Teller asociados a las transiciones  $\beta^\pm$  como

$$\hat{M}_{F_\pm} = \sum_i \hat{\tau}_{i\pm} \quad (\text{B.1})$$

y

$$\hat{M}_{GT_\pm} = \sum_i \hat{\sigma}_i \hat{\tau}_{i\pm} \quad (\text{B.2})$$

que, escritos en segunda cuantización, cabe diferenciar qué tipo de desintegración se está considerando. En el caso de la transición de Fermi, considerando el operador de isospín,

$$\hat{M}_{F_+} = \sum_{ab} (\hat{\mathbb{I}})_{ab} c_{a_n}^\dagger c_{b_p} \quad (\text{B.3})$$

$$\hat{M}_{F_-} = \sum_{ab} (\hat{\mathbb{I}})_{ab} c_{a_p}^\dagger c_{b_n} \quad (\text{B.4})$$

y para la de Gamow-Teller, dado que es un operador vectorial, podemos trabajar en la base esférica, por lo que

$$\hat{M}_{GT_+}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{\sigma}_\mu)_{ab} c_{a_n}^\dagger c_{b_p} \quad (\text{B.5})$$

$$\hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{\sigma}_\mu)_{ab} c_{a_p}^\dagger c_{b_n} \quad (\text{B.6})$$

donde los operadores  $\sigma_\mu$  –matrices de Pauli– se relacionan con el operador de espín según

$$\hat{\sigma}_\mu = 2\hat{S}_\mu \quad (\text{B.7})$$

como siempre, en el sistema de unidades tal que  $\hbar = 1$ .

## B.2. Cálculo explícito del solape entre estados proyectados

Dado que queremos hallar los elementos de matriz reducidos de estas transiciones, de igual modo que en el apéndice A, será necesario el cálculo del solape entre estados proyectados. Por simplicidad de desarrollo, consideramos inicialmente el operador de Gamow-Teller. Así, los resultados para la transición de Fermi serán una simplificación de los resultados obtenidos considerando que el operador es escalar bajo rotaciones.

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{GT_\pm}^{J_1 J_2 \pi N_1 N_2 Z_1 Z_2}(q, q') = \\ \sum_{K_1 K_2} a_{K_1}^{J_1^*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') \langle \phi(q) | \hat{P}^{Z_1} \hat{P}^{N_1} \hat{P}^\pi \hat{P}_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{M}_{GT_\pm}^{1\mu} \hat{P}_{M_2 K_2}^{J_2} \hat{P}^\pi \hat{P}^{N_2} \hat{P}^{Z_2} | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

donde cabe destacar que los estados final e inicial presentarán un número distinto de protones y neutrones dada la naturaleza de la transición. Además, por simplicidad consideramos que ambos estados presentarán la misma paridad, dado que son las transiciones con mayor probabilidad.

Teniendo en cuenta como se transforma nuestro operador bajo rotaciones (cálculo desarrollado en el apéndice anterior), se puede demostrar que

$$P_{K_1 M_1}^{J_1} \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} = \sum_{JMK\mu'} \langle JM1\mu' | J_1 K_1 \rangle \langle JK1\mu | J_1 M_1 \rangle \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} P_{MK}^J \quad (\text{B.9})$$

por lo que, junto con la propiedad (3.81b), entonces el solape queda tal que

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{GT_{\pm}}^{J_1 J_2 \pi N_1 N_2 Z_1 Z_2}(q, q') &= \sum_{K_1 K_2 M \mu'} \langle J_2 M 1 \mu' | J_1 K_1 \rangle \langle J_2 M 2 1 \mu | J_1 M_1 \rangle \cdot \\ &\cdot a_{K_1}^{J_1*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') \langle \phi(q) | \hat{P}^{Z_1} \hat{P}^{N_1} \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} \hat{P}_{MK_2}^{J_2} \hat{P}^{\pi} \hat{P}^{N_2} \hat{P}^{Z_2} | \phi(q') \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

donde, además, se ha considerado que el proyector a paridad conmuta con el resto de operadores y satisface idempotencia.

Si bien la estrategia anterior era ya conocida por el desarrollo del solape de los operadores multipolares, para considerar los proyectores a número de partículas es necesario tener en cuenta las propiedades de conmutación entre los operadores de creación y aniquilación fermiónicos. Como ejemplo ilustrativo, consideramos el operador  $\hat{M}_{GT_-}^{1\mu}$ , asociado a la desintegración  $\beta^-$ . Dada la definición (B.6), entonces,

$$\hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} \hat{P}^{Z_1} c_{a_p}^\dagger c_{b_n} \quad (\text{B.11})$$

por lo que utilizando la definición del proyector correspondiente, dada por (3.48b), podemos reescribir lo anterior como

$$\hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_Z e^{-i\varphi_Z Z_1} e^{i\varphi_Z \hat{Z}} c_{a_p}^\dagger c_{b_n} \quad (\text{B.12})$$

ahora bien, si reescribimos el operador exponencial en serie de potencias, teniendo en cuenta que  $\hat{Z}$  es idempotente, entonces

$$\hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_Z e^{-i\varphi_Z Z_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\varphi_Z)^n}{n!} \hat{Z} c_{a_p}^\dagger c_{b_n} \quad (\text{B.13})$$

que, reescribiendo el operador de número de protones en segunda cuantización nos

quedaría como

$$\hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_Z e^{-i\varphi_Z Z_1} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\varphi_Z)^n}{n!} \sum_{\alpha} c_{\alpha p}^{\dagger} c_{\alpha p} c_{a_p}^{\dagger} c_{b_n} \quad (\text{B.14})$$

Centrándonos en la última parte de la expresión, podemos utilizar las propiedades de conmutación de los operadores fermiónicos. Así, dicha parte se puede reescribir como

$$\sum_{\alpha} c_{\alpha p}^{\dagger} c_{\alpha p} c_{a_p}^{\dagger} = c_{a_p}^{\dagger} (1 + \sum_{\alpha} c_{\alpha p}^{\dagger} c_{\alpha p}) = c_{a_p}^{\dagger} (1 + \hat{Z}) \quad (\text{B.15})$$

por lo que la expresión (B.12) ahora queda

$$\begin{aligned} \hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} &= \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} c_{a_p}^{\dagger} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_Z e^{-i\varphi_Z Z_1} e^{i\varphi_Z (\hat{Z}+1)} c_{b_n} = \\ &= \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} c_{a_p}^{\dagger} \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi_Z e^{-i\varphi_Z (Z_1-1)} e^{i\varphi_Z \hat{Z}} c_{b_n} = \hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \sum_{ab} (\hat{M}_{GT_-}^{1\mu})_{ab} c_{a_p}^{\dagger} \hat{P}^{Z_1-1} c_{b_n} \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

Por último, dado que el último operador de destrucción actúa sobre estados de neutrones, debe conmutar con el proyector a  $Z_1$ , por tanto,

$$\hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} = \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} \hat{P}^{Z_1-1} \quad (\text{B.17})$$

y utilizando las propiedades del proyector a  $Z_2$ , entonces

$$\hat{M}_{GT_-}^{1\mu} \hat{P}^{Z_1-1} \hat{P}^{Z_2} = \hat{M}_{GT_-}^{1\mu} \delta_{Z_1-1 Z_2} \hat{P}^{Z_2} \quad (\text{B.18})$$

Con esta misma estrategia de trabajo, es fácil demostrar la generalización utilizando el proyector a número de neutrones y con ambos operadores de Gamow-Teller asociados a las desintegraciones  $\beta^{\pm}$ ,

$$\hat{P}^{Z_1} \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} \hat{P}^{Z_2} = \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} \hat{P}^{Z_2} \delta_{Z_1 \pm 1 Z_2} \quad (\text{B.19})$$

$$\hat{P}^{N_1} \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} \hat{P}^{N_2} = \hat{M}_{GT_{\pm}}^{1\mu} \hat{P}^{N_2} \delta_{N_1 \mp 1 N_2} \quad (\text{B.20})$$

así, el solape entre estados proyectados vendrán dados por la expresión siguiente:

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{GT\pm}^{J_1 J_2 \pi N_1 N_2 Z_1 Z_2}(q, q') &= \sum_{K_1 K_2 M \mu'} \langle J_2 M 1 \mu' | J_1 K_1 \rangle \langle J_2 M 2 1 \mu | J_1 M_1 \rangle \cdot \\ &\cdot a_{K_1}^{J_1^*}(q) a_{K_2}^{J_2}(q') \langle \phi(q) | \hat{M}_{GT\pm}^{1\mu} \hat{P}_{MK_2}^{J_2} \hat{P}^\pi \hat{P}^{N_2} \hat{P}^{Z_2} | \phi(q') \rangle \delta_{Z_1 \pm 1 Z_2} \delta_{N_1 \mp 1 N_2} \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

por lo que el elemento de matriz reducido, desarrollando la proyección a paridad y cambiando la notación por los estados inicial y final, queda del siguiente modo:

$$\begin{aligned} \langle \Phi^{\Gamma_f}(q) | | \hat{M}_{GT\pm} | | \Phi^{\Gamma_i}(q') \rangle &= \frac{\sqrt{2J_f + 1}}{2} \sum_{K_f K_i M \mu'} \langle J_i M 1 \mu' | J_f K_f \rangle a_{K_f}^{J_f^*}(q) a_{K_i}^{J_i}(q') \cdot \\ &\cdot \delta_{N_f \mp 1 N_i} \delta_{Z_f \pm 1 Z_i} \left[ \langle \phi(q) | \hat{M}_{GT\pm}^{1\mu} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{P}^{N_i} \hat{P}^{Z_i} | \phi(q') \rangle + \pi \langle \phi(q) | \hat{M}_{GT\pm}^{1\mu} \hat{P}_{MK_i}^{J_i} \hat{P}^{N_i} \hat{P}^{Z_i} \hat{\Pi} | \phi(q') \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

donde  $\Gamma$  indica el conjunto de número cuánticos  $J, \pi N, Z$ .

En el caso del solape del operador de Fermi, basta con tomar el resultado anterior e imponer que es un operador escalar, esto es, un tensor de orden 0. Por tanto,

$$\begin{aligned} \langle \Phi^{\Gamma_f}(q) | | \hat{M}_{F\pm} | | \Phi^{\Gamma_i}(q') \rangle &= \frac{\sqrt{2J_f + 1}}{2} \sum_{K_f K_i} a_{K_f}^{J_f^*}(q) a_{K_i}^{J_i}(q') \cdot \\ &\cdot \delta_{N_f \mp 1 N_i} \delta_{Z_f \pm 1 Z_i} \left[ \langle \phi(q) | \hat{M}_{F\pm}^{1\mu} \hat{P}_{K_f K_i}^{J_i} \hat{P}^{N_i} \hat{P}^{Z_i} | \phi(q') \rangle + \pi \langle \phi(q) | \hat{M}_{F\pm}^{1\mu} \hat{P}_{K_f K_i}^{J_i} \hat{P}^{N_i} \hat{P}^{Z_i} \hat{\Pi} | \phi(q') \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

pues

$$\langle J_i M 0 0 | J_f K_f \rangle = \delta_{J_i J_f} \delta_{M K_f} \quad (\text{B.24})$$

En cuanto a estos últimos solapes, pueden ser calculados de modo similar a las expresiones (A.21) y (A.22), por lo que se han omitido sus expresiones.

### B.3. Elementos de matriz de los operadores de Gamow-Teller y Fermi

Para el operador de Gamow-Teller, teniendo en cuenta la relación entre las matrices de Pauli y el operador de espín dado por (B.7), entonces es fácil ver que

$$(\hat{M}_{GT})_{ab} \equiv \langle n_a l_a j_a m_{j_a} | \hat{M}_{GT\pm}^{1\mu} | n_b l_b j_b m_{j_b} \rangle = 2 \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} \langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \hat{S}_\mu | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle C_{lm_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{lm_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \quad (\text{B.25})$$

donde, una vez más, se ha desacoplado la base del oscilador. Así, utilizando la expresión (A.39), nos queda

$$(\hat{M}_{GT})_{ab} = \sqrt{3} \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{lm_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{lm_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} C_{\frac{1}{2} m_{s_a} 1 \mu}^{\frac{1}{2} m_{s_b}} \delta_{n_a n_b} \delta_{l_a l_b} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \quad (\text{B.26})$$

Por último, para el operador de Fermi,

$$(\hat{M}_F)_{ab} = \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} \langle n_a l_a m_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a} | \mathbb{I} | n_b l_b m_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b} \rangle C_{lm_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{lm_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \quad (\text{B.27})$$

lo que nos lleva a

$$(\hat{M}_F)_{ab} = \sum_{\substack{m_{l_a} m_{l_b} \\ m_{s_a} m_{s_b}}} C_{lm_{l_a} \frac{1}{2} m_{s_a}}^{j_a m_{j_a}} C_{lm_{l_b} \frac{1}{2} m_{s_b}}^{j_b m_{j_b}} \delta_{n_a n_b} \delta_{l_a l_b} \delta_{m_{l_a} m_{l_b}} \delta_{m_{s_a} m_{s_b}} \quad (\text{B.28})$$

---

# Índice de figuras

2.1. Distintas órbitas dadas por el modelo de capas nuclear. Los números contenidos en círculos indican los mágicos asociado a la expresión (2.1). Extraído de [32]. . . . .	9
2.2. Diagrama esquemático de los principales métodos de obtención de la interacción nuclear en función del número de nucleones involucrados.	14
3.1. Tiempo de cálculo para distinto número de puntos de integración en los ángulos de Euler para un estado triaxial con $Z = 4, N = 8$ en el espacio de valencia asociado a las interacciones USD, KB3G y PFSDG. Para el cálculo se ha utilizado un Intel Xeon E5-2650L v3 @ 1.80 GHz. El tiempo de cálculo dependerá de las especificaciones técnicas del procesador que se use. . . . .	47
3.2. Energía (a) total y de apareamiento (b) protón-protón y (c) neutrón-neutrón en función del parámetro deformación axial $\beta_2$ obtenidas con las minimizaciones HFB y PNVAP para el núcleo $^{26}\text{Ne}$ ( $Z = 2$ y $N = 8$ en el espacio de valencia) con la interacción USD. . . . .	59
3.3. Curvas de energía total en función de $\beta_2$ utilizando estados intrínsecos axiales obtenidos con (a) HFB y (b) PNVAP antes y después de proyectar a buen número de partículas y $J = 0$ para el núcleo $^{26}\text{Ne}$ ( $Z = 2$ y $N = 8$ en el espacio de valencia) con la interacción USD. . .	60



- 3.4. Curvas de energía total proyectadas a buen número de partículas y  $J = 0, 2, 4$  utilizando estados intrínsecos axiales obtenidos con (a) HFB y (b) PNVAP; (c) distribución de la norma proyectada a  $J = 0, 2, 4$  entre estados PNVAP para el núcleo  $^{26}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 8$  en el espacio de valencia) con la interacción USD. . . . . 62
- 3.5. Energía PGCM en función del número de autovalores en la base natural para los estados  $J_{\sigma}^{\pi} = 0_1^+, 2_1^+, 4_1^+$  con estados intrínsecos obtenidos con (a) HFB y (b) PNVAP para el núcleo de  $^{26}\text{Ne}$ . . . . . 64
- 3.6. Energías de excitación PGCM con estados intrínsecos HFB (puntos negros) y PNVAP (cuadrados azules) e ISM (diamantes rojos) para los estados  $J_{\sigma} = 0, 2, 4$  con  $\sigma = 1, 2$  para el núcleo de  $^{26}\text{Ne}$ . El origen de energías viene dado por la energía del estado fundamental ISM. . . . . 65
- 3.7. Pesos de la función de onda colectiva PGCM con estados PNVAP,  $|F(\beta_2)|^2$ , para los estados de menor energía (a)  $0_1^+$ , (b)  $0_2^+$ , (c)  $2_1^+$  y  $4_1^+$  del núcleo  $^{26}\text{Ne}$ . . . . . 66
- 4.1. Energía HFB total (primera fila), amplitudes de apareamiento isoescalar (segunda fila), isovectorial (tercera fila) y momentos cuadrupolares (cuarta fila) obtenidas en 650 soluciones al cálculo HFB sin ligaduras con semillas (a)-(d) axial *pn-no*, (e)-(h) general *pn-no* y (i)-(l) general *pn-yes* para el núcleo  $^{24}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 6$  en el espacio de valencia) con la interacción USD. . . . . 72
- 4.2. Igual que la Fig. 4.1 pero con el método PNVAP. . . . . 73
- 4.3. Distribución en autoestados de los operadores de número de protones y neutrones de las funciones de onda intrínsecas obtenidas con HFB/PNVAP con diferentes semillas: (a) HFB axial *pn-no*; (b) HFB general *pn-no*; (c) HFB general *pn-yes*; (d) PNVAP axial *pn-no*; (e) PNVAP general *pn-no* y (f) PNVAP general *pn-yes*. El núcleo considerado es el  $^{24}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 6$  en el espacio de valencia) con la interacción USD. . . . . 75

- 4.4. Energías (a) HFB y (b) PNVAP calculadas con las semillas axial *pn-no* (puntos rojos), general *pn-no* (cuadrados azules) y general *pn-yes* (diamantes negros) en función de la etiqueta del nivel de neutrones inicial bloqueado en la capa *sd* (de izquierda a derecha: órbitas  $0d_{3/2}$ ,  $0d_{5/2}$  y  $1s_{1/2}$ ). El núcleo considerado es el  $^{25}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 7$  en el espacio de valencia) con la interacción USD. . . . . 77
- 4.5. Igual que la Fig. 4.3 pero para el núcleo  $^{25}\text{Ne}$  ( $Z = 2$  y  $N = 7$  en el espacio de valencia). . . . . 79
- 4.6. Energías (a) HFB y (b) PNVAP calculadas con las semillas axial *pn-no* (puntos rojos), general *pn-no* (cuadrados azules) y general *pn-yes* (diamantes negros) en función de la etiqueta del bloqueo (de protones y neutrones) en la capa *sd*. El núcleo considerado es el  $^{24}\text{Na}$  ( $Z = 3$  y  $N = 5$  en el espacio de valencia) con la interacción USD. . . . . 81
- 4.7. Igual que la Fig. 4.3 pero para el núcleo  $^{24}\text{Na}$  ( $Z = 3$  y  $N = 5$  en el espacio de valencia). . . . . 82
- 4.8. Diferencia de energía con respecto de la solución exacta para los cálculos sin ligaduras HFB (color rojo) y PNVAP (color negro) para los núcleos par-par y par-impar de la capa *sd* y la interacción USD. Se han usado las semillas general *pn-no* (cajas y puntos) y *pn-yes* (círculos y cuadrados rellenos). . . . . 85
- 4.9. Igual que la Fig. 4.8 pero para los isótopos impar-impar. Para el caso HFB solo se han usado semillas generales *pn-no*. . . . . 87
- 4.10. Superficies de energía total en función de las deformaciones triaxiales ( $\beta_2, \gamma$ ) del  $^{24}\text{Ne}$  con las aproximaciones (a) HFB *pn-no*, (b) PNVAP *pn-no* y (c) PNVAP *pn-yes*. Las curvas de nivel están separadas en intervalos de 0.25 MeV y la escala de color es diferente en cada representación. . . . . 89
- 4.11. Superficies de energía total PNVAP para el  $^{24}\text{Ne}$  en función de la deformación cuadrupolar  $\beta_2$  y apareamiento (a) isoescalar,  $\delta_{M_{J_p}=0M_{T_p}=0}^{J_p=1T_p=0}$ , (b) *pn* isovectorial,  $\delta_{M_{J_p}=0M_{T_p}=0}^{J_p=0T_p=1}$ , (c) *nn*  $\delta_{M_{J_p}=0M_{T_p}=+1}^{J_p=0T_p=1}$  y (d) *pp*,  $\delta_{M_{J_p}=0M_{T_p}=-1}^{J_p=0T_p=1}$ . Las curvas de nivel están separadas en intervalos de 0.25 MeV y la escala de colores es la misma en todos los paneles. . . . . 90

- 4.12. Energías PGCM y exacta de los estados yrast del  $^{24}\text{Ne}$  calculados con la interacción USD. (a) PGCM explorando el plano  $(\beta_2, \gamma)$  con HFB y PNVAP y (b) PGCM explorando  $(\beta_2, \delta_{M_{J_p} T_p}^{J_p T_p})$  con PNVAP. . . . . 91
- 4.13. Diferencia en la energía del estado fundamental PGCM con respecto la exacta usando  $(\beta_2, \gamma)$  como coordenadas generadoras para los núcleos par-par y par-impar en la capa *sd* con la interacción USD. Se han utilizado tres tipos de estados HFB: general *pn-no* (círculos negros), general *pn-yes* (cuadrados rellenos negros) ambos con PNVAP y general *pn-yes* con HFB (puntos rojos). . . . . 94
- 4.14. Igual que la Fig. 4.13 pero para los isótopos impar-impar. Los resultados HFB solo incluyen semillas generales *pn-no*. Las cruces magenta muestran los resultados PNVAP-PGCM incluyendo el apareamiento con  $M_{T_p} = 0$  junto con  $(\beta_2, \gamma)$ . . . . . 95
- 4.15. Energías de los estados  $0_2^+$  (paneles superiores),  $2_1^+$  (paneles intermedios) y  $4_1^+$  (paneles inferiores) de los núcleos par-par en la capa *sd* calculados exactamente (diamantes negros), usando PNVAP-PGCM con mezcla *pn* (puntos rojos), PNVAP-PGCM sin mezcla *pn* (cuadrados azules) y HFB-PGCM (pentágonos verdes). . . . . 98
- 4.16. Energías del primer (paneles superiores), segundo (paneles intermedios) y tercer (paneles inferiores) estado excitado de los núcleos par-impar en la capa *sd* calculados exactamente (diamantes negros), usando PNVAP-PGCM con mezcla *pn* (puntos rojos), PNVAP-PGCM sin mezcla *pn* (cuadrados azules) y HFB-PGCM (pentágonos verdes). . . . . 99

- 4.17. Energías del primer estado excitado de los núcleos impar-impar en la capa *sd* calculados exactamente (diamantes negros), usando HFB-PGCM (pentágonos verdes) y PNVAP-PGCM con mezcla *pn* (puntos rojos) y sin mezcla (cuadrados azules). El momento angular usado como estado fundamental y primer estado excitado son aquellos obtenidos con la diagonalización exacta. Los símbolos vacíos indican aquellos casos en los que no coincide el momento angular exacto con el obtenido variacionalmente. Las cruces magenta muestran los resultados PGCM incluyendo como coordenada generadora el apareamiento con  $M_{T_p} = 0$  junto con  $(\beta_2, \gamma)$ . . . . . 102
- 4.18. Propiedades electromagnéticas calculadas con HFB-PGCM (pentágonos verdes), PNVAP-PGCM con (puntos rojos) y sin mezcla *pn* (cuadrados azules) para algunos estados en los isótopos de Ne: (a)  $B(E2, 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$  para los casos par-par; (b)  $B(E2, J_{1st\ exc}^+ \rightarrow J_{g.s.}^+)$  para los casos par-impar; (c)  $B(M1, 3_1^+ \rightarrow 2_1^+)$  para los par-par; (d) momento dipolar magnético,  $\mu$  para el estado fundamental de los isótopos par-impar. . . . . 103
- 5.1. Superficies de energía total en función de los grados de libertad cuadrupolares  $(\beta_2, \gamma)$  calculadas usando las aproximaciones: (a) HFB, (b) PNVAP. y sus respectivas proyecciones a buen momento angular ( $J = 0$ ) y de partículas, esto es, (c) HFB+PNAMP y (d) PNVAP+PNAMP. Las superficies están normalizadas a sus respectivos mínimos. (a) -6.446 MeV, (b) -7.195 MeV, (c) -6.896 MeV y (d) -7.209 MeV. . . . . 109
- 5.2. Superficies de energía total en función de los grados de libertad cuadrupolares  $(\beta_2, \gamma)$  calculadas usando las aproximaciones: (a) HFB, (b) PNVAP. y sus respectivas proyecciones a buen momento angular ( $J = 0$ ) y de partículas, esto es, (c) HFB+PNAMP y (d) PNVAP+PNAMP. Las superficies están normalizadas a sus respectivos mínimos. (a) -6.446 MeV, (b) -7.195 MeV, (c) -6.896 MeV y (d) -7.209 MeV. . . . . 110
- 5.3. Espectro de energías para el  $^{48}\text{Ca}$  calculado con exactamente y con el método PGCM con las diferentes mallas de estados. . . . . 112

5.4. Funciones de onda colectivas $ F_{\sigma}^{\Gamma}(\beta_2, \gamma) ^2$ para los estados más bajos $0^+, 2^+$ y $4^+$ del $^{48}\text{Ca}$ en la aproximación PGCM <sub>2</sub> . . . . .	113
5.5. Funciones de onda colectivas $ F_{\sigma}^{\Gamma}(\beta_2, \delta_{nn}) ^2$ para los estados más bajos $0^+, 2^+$ y $4^+$ del $^{48}\text{Ca}$ en la aproximación PGCM <sub>3</sub> . . . . .	115
5.6. (a) Energía de los distintos estados fundamentales y (b) diferencias entre los valores aproximados y exactos calculados para la cadena de isótopos $^{42-60}\text{Ca}$ con diferentes aproximaciones variacionales. Los resultados ISM se han representado con una línea negra discontinua. . . . .	118
5.7. Energías de excitación en función del momento angular calculado con ISM y los diferentes esquemas PGCM para los isótopos pares del Ca. . . . .	120
5.8. Energías de excitación en función del momento angular calculado con ISM y los diferentes esquemas PGCM para los isótopos impares del Ca. . . . .	121
5.9. Energías de excitación para los isótopos pares del Ca calculados con el método ISM y los diferentes esquemas PGCM. . . . .	123
5.10. Diferencia entre los números de ocupación calculados con ISM y el esquema PGCM <sub>3</sub> . El eje horizontal representa el $j$ de las cuatro posibles capas de neutrones la capa $pf$ . . . . .	124
6.1. Diferencia de energías entre el hamiltoniano completo KB3 y los hamiltonianos de apareamiento isoescalar (P10) e isovectorial (P01) para las cadenas (a) $A = 46$ , (b) $A = 48$ y (c) $A = 50$ . La figura está adaptada de la referencia [130]. . . . .	130
6.2. Parábola de masas de núcleos par-par e impar-impar de la cadena isobárica $A = 76$ . Las líneas verdes indican las transiciones $\beta$ . La línea rosa indica la desintegración $\beta\beta$ . Extraído de [132]. . . . .	131
6.3. Elementos de matriz de Gamow-Teller de la desintegración $0\nu\beta\beta$ en función del número de neutrones del núcleo inicial eliminando distintos términos del hamiltoniano colectivo y comparando con la interacción completa KB3G. Extraído de [144]. . . . .	133
6.4. Energía de apareamiento $pn$ (en valor absoluto) de los estados intrínsecos PNVAP para los núcleos par-par, par-impar, impar-par e impar-impar en la capa (a) $sd$ y (b) $pf$ obtenidos con las interacciones USD y KB3G, respectivamente. . . . .	135

- 6.5. Amplitudes de apareamiento  $\delta_{00}^{01}$  (columna izquierda) y  $\delta_{00}^{10}$  (columna derecha) de los estados intrínsecos PNVAP para los núcleos par-par, par-impar, impar-par e impar-impar en la capa (a)-(b) *sd* y (c)-(d) *pf* obtenidos con las interacciones USD y KB3G, respectivamente. . . . . 136
- 6.6. Energía HFB (paneles superiores) y de apareamiento (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pp}$  y (c)-(d)  $\delta_{nn}$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD. . . . . 139
- 6.7. Ocupaciones de las subcapas  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$  y  $0d_{3/2}$  de protones (paneles superiores) y neutrones (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pp}$  y (c)-(d)  $\delta_{nn}$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD. . . . . 140
- 6.8. Energía HFB (paneles superiores) y de apareamiento para las ramas con  $E_{pp/nn} \neq 0$  (paneles intermedios) y  $E_{pp/nn} = 0$  (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(c)  $\delta_{pn}^1$  y (d)-(f)  $\delta_{pn}^0$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD. . . . . 141
- 6.9. Energía HFB y PNPAV (ver texto) para las ramas con  $E_{pp/nn} \neq 0$  (paneles superiores) y  $E_{pp/nn} = 0$  (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pn}^1$  y (c)-(d)  $\delta_{pn}^0$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD. . . . . 143
- 6.10. Ocupaciones de las subcapas  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$  y  $0d_{3/2}$  de protones (paneles superiores) y neutrones (paneles inferiores) en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(b)  $\delta_{pn}^1$  y (c)-(d)  $\delta_{nn}^0$  para el  $^{30}\text{Mg}$  con la interacción USD. . . . . 144
- 6.11. Espectro de bajas energías de paridad positiva hasta  $J = 7/2$  y  $\sigma = 2$  del isótopo  $^{31}\text{Al}$  obtenidos con el método PGCM y las diferentes coordenadas generadoras. Se incluye el cálculo ISM (última columna). En ambos casos se ha tomado la interacción USD y las energías están normalizadas a la energía del estado fundamental exacta. . . . . 146

- 6.12. Espectro de bajas energías de paridad positiva hasta  $J = 7/2$  y  $\sigma = 2$  del isótopo  $^{31}\text{Si}$  obtenidos con el método PGCM y las diferentes coordenadas generadoras. Se incluye el cálculo ISM (última columna). En ambos casos se ha tomado la interacción USD y las energías están normalizadas a la energía del estado fundamental exacta. Se muestran solamente los estados con energías de excitación inferiores a 8 MeV. . . . . 147
- 6.13. Elementos de matriz nuclear total,  $M^{0\nu}$  (a) en función del parámetro  $\beta$  del Ca  $-\beta_I-$  y del Ti  $-\beta_F-$  y (b) en función de  $\beta_F$  para  $\beta_I=0.00$ , siendo  $\beta = (4\pi/3r_0A^{5/3})\sqrt{q_{20}^2 + 2q_{22}^2}$ . Extraído de [149]. . . . . 150
- 6.14. Elementos de matriz de  $M_F^{0\nu}$  (en valor absoluto),  $M_{GT}^{0\nu}$ ,  $M_T^{0\nu}$  y  $M_{tot}^{0\nu}$  en función del parámetro  $\beta_2$  del  $^{48}\text{Ca}$  ( $\beta_{2i}$ ) y del  $^{48}\text{Ti}$  ( $\beta_{2f}$ ) sin incluir la mezcla  $pn$  (fila superior), incluyendo pares  $pn$  isoescalares (fila intermedia) e isovectoriales (fila inferior). Las zonas sombreadas representan las regiones exploradas por las funciones de onda colectivas. 152
- 6.15. Amplitudes de los canales de apareamiento  $pn$  isoescalar e isovectorial para los estados intrínsecos del  $^{48}\text{Ti}$  (a) con  $\delta_{pn}^1 = 0$  y (b) con  $\delta_{pn}^0 = 0$  en función del parámetro de deformación  $\beta_2$ . . . . . 153
- 6.16. Elementos de matriz  $M_F$ ,  $M_{GT}$ ,  $M_T$  y  $M^{0\nu}$  en función de las amplitudes de apareamiento (a)-(d)  $\delta_{pp}$ , (e)-(h)  $\delta_{nn}$ , (i)-(l)  $\delta_{pn}^1$  y (m)-(p)  $\delta_{pn}^0$  en el núcleo de  $^{48}\text{Ti}$  para la desintegración  $^{48}\text{Ca} \rightarrow ^{48}\text{Ti}$ . . . . . 156
- 6.17. Elementos de matriz  $M_F$ ,  $M_{GT}$ ,  $M_T$  y  $M^{0\nu}$  entre estados HFB en función de  $\delta_{nn}$  del Ca y (a)-(d)  $\delta_{pp}$ , (e)-(h)  $\delta_{nn}$ , (i)-(l)  $\delta_{pn}^1$  y (m)-(p)  $\delta_{pn}^0$  del Ti. La escala de colores del panel (d) se ha fijado entre -1 y -0.5 para poder visualizar mejor las curvas de nivel. . . . . 158
- 6.18. Elementos de matriz  $-M_F^{0\nu}$  y  $M_{GT}^{0\nu}$  para las desintegraciones  $\text{Ca} \rightarrow \text{Ti}$  con distinto  $A$  empleando diferentes esquemas variacionales junto con el resultado ISM *seniority* 0 (paneles superiores) y completo (paneles inferiores) con la interacción KB3G. . . . . 162

- 
- 6.19. Diferencia de energías del estado fundamental respecto del cálculo exacto (columna izquierda) para el Ca y Ti. En el caso del Ca, PGCM<sub>2,3</sub> indica el generador en  $\beta_2, \delta_{nn}$ . La referencia en la escala es la energía exacta obtenida con la diagonalización con estados sin ruptura de pares (paneles superiores) y completa (paneles inferiores). . . . . 164
- 6.20. Diferencia de energías del estado fundamental respecto del cálculo exacto (columna izquierda) para el Ca y Ti. En el caso del Ca, PGCM<sub>2,3</sub> indica el generador en  $\beta_2, \delta_{nn}$ . La referencia en la escala es la energía exacta obtenida con la diagonalización con estados sin ruptura de pares (paneles superiores) y completa (paneles inferiores). . . . . 165





---

# Índice de cuadros

3.1. Algunos valores medios de $J^2$ tras el cálculo PNAMP en función de los puntos de integración para un estado triaxial de $^{26}\text{Ne}$ . . . . .	48
3.2. Resumen de los valores mínimos de la energía del estado fundamental del $^{26}\text{Ne}$ (expresados en MeV) obtenidos con los métodos HFB/PNVAP, PNAMP y PGCM al considerar las dos minimizaciones HFB y PNVAP para la obtención de los estados intrínsecos. Las dos columnas de la derecha representan la desviación respecto del valor exacto de la energía (expresada en MeV), $\Delta E = E - E_{\text{ISM}}$ . . . . .	65
3.3. Probabilidades de transición cuadrupolares eléctricas, $B(E2)$ , en $e^2\text{fm}^4$ y momentos, $Q(J^\pi)$ en $\text{efm}^2$ calculados con la aproximación PGCM con estados intrínsecos axiales obtenidos con PNVAP (izquierda) y con la diagonalización exacta (derecha) para el $^{26}\text{Ne}$ . . . . .	67
4.1. Estados del oscilador que componen la capa $sd$ con sus respectivos números cuánticos y etiqueta de bloqueo en núcleos par-impar con simetría axial. . . . .	78
4.2. Probabilidades de transición cuadrupolares eléctricas, $B(E2)$ , en $e^2\text{fm}^4$ y momentos, $Q(J^\pi)$ en $\text{efm}^2$ calculados con las diferentes aproximaciones PGCM y con la diagonalización exacta para el $^{24}\text{Ne}$ . . . . .	92

- 4.3. Valores RMSD (expresados en MeV) de las distintas aproximaciones variacionales PGCM (HFB y PNVAP con y sin mezcla  $pn$ ) con respecto de los resultados exactos para los núcleos par-par ( $e-e$ ), par-impar ( $e-o$ ) e impar-impar ( $o-o$ ). Para los estados excitados, los números de la izquierda y derecha indican la desviación con respecto los valores de la energía absoluta y de excitación, respectivamente. . . . . 97
- 5.1. Probabilidades de transición reducidas  $B(E2)$  y momentos cuadrupolares eléctricos espectroscópicos,  $Q$ , calculados con los diferentes métodos usando las cargas efectivas 1.5 y 0.5 para protones y neutrones, respectivamente. Las unidades para las transiciones son  $e^2\text{fm}^4$  y para los momentos  $\text{efm}^2$ . . . . . 113
- 5.2. Números de ocupación calculados para los dos estados de menor energía con  $0^+$ ,  $2^+$  y  $4^+$  del  $^{48}\text{Ca}$  con ISM y los diferentes esquemas PGCM. . 116
- 5.3. Dimensión de las matrices del Hamiltoniano en el cálculo ISM (valores de la izquierda) y PGCM<sub>3</sub> (valores de la derecha) para los núcleos pares (fila superior) e impares (fila inferior) de la cadena isotópica del Ca en la capa  $pf$ . . . . . 125
- 6.1. Parámetros de apareamiento  $\delta_{M_{J_p} M_{T_p}}^{J_p T_p}$  —dados por las definiciones (3.22)— autoconsistentes del estado de mínima energía para el  $^{31}\text{Al}$  y  $^{31}\text{Si}$  en el cálculo PNVAP sin ligaduras con la interacción USD. . . . . 145
- 6.2. Probabilidades de transición GT entre el  $^{31}\text{Al}$  ( $5/2_1$ ) y el  $^{31}\text{Si}$  ( $J_f \sigma_f$ ) con los distintos generadores de coordenadas y el resultado exacto ISM, ambos con la interacción USD. . . . . 149
- 6.3. Elementos de matriz nucleares de la transición  $0\nu\beta\beta$  del  $^{48}\text{Ca}$  al  $^{48}\text{Ti}$  explorando  $\beta_2$  sin mezcla  $pn$  (PGCM<sub>1</sub>), con correlaciones  $pn$  isoesca- lares (PGCM<sub>2</sub>) e isovectoriales (PGCM<sub>3</sub>), junto con las energías del estado fundamental del Ti y Ca obtenidas con los distintos esquemas variacionales. . . . . 154

---

6.4. Valores medios GCM de los elementos de matriz nucleares de la transición  $0\nu\beta\beta$  del  $^{48}\text{Ca}$  al  $^{48}\text{Ti}$  explorando las distintas amplitudes de apareamiento  $\delta_f$  del Ti, junto con las energías del estado fundamental del Ti y Ca obtenidas con los distintos esquemas variacionales. . . . . 160



---

# Bibliografía

- [1] J. Chadwick, *Nature* **129**, 312 (1932).
- [2] E. D. Bloom et al., *Phys. Rev. Lett.* **23**, 930 (1969).
- [3] R. Machleidt and F. Sammarruca, *Physica Scripta* **91**, 083007 (2016).
- [4] R. Machleidt and D. Entem, *Physics Reports* **503**, 1 (2011).
- [5] S. K. Bogner, R. J. Furnstahl, and R. J. Perry, *Phys. Rev. C* **75**, 061001 (2007).
- [6] E. D. Jurgenson, P. Navrátil, and R. J. Furnstahl, *Phys. Rev. Lett.* **103**, 082501 (2009).
- [7] P. Navrátil, R. Roth, and S. Quaglioni, *Phys. Rev. C* **82**, 034609 (2010).
- [8] E. Epelbaum et al., *Phys. Rev. Lett.* **112**, 102501 (2014).
- [9] R. Roth, *Nuclear Physics A* **805**, 416c (2008), INPC 2007.
- [10] E. Caurier, G. Martínez-Pinedo, F. Nowacki, A. Poves, and A. P. Zuker, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 427 (2005).
- [11] M. Bender, P. Heenen, and P. Reinhard, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 121 (2003).
- [12] J. L. Egido, *Physica Scripta* **91**, 073003 (2016).
- [13] S. R. Stroberg, J. D. Holt, A. Schwenk, and J. Simonis, *Phys. Rev. Lett.* **126**, 022501 (2021).
- [14] T. Miyagi, S. R. Stroberg, J. D. Holt, and N. Shimizu, *Phys. Rev. C* **102**, 034320 (2020).

- 
- [15] S. R. Stroberg, H. Hergert, J. D. Holt, S. K. Bogner, and A. Schwenk, *Phys. Rev. C* **93**, 051301 (2016).
- [16] P. Ring and P. Schuck, *The nuclear many-body problem*, Springer-Verlag, New York, 1980.
- [17] C. Wa Wong, *Physics Reports* **15**, 283 (1975).
- [18] K. Washiyama et al., *Phys. Rev. C* **86**, 054309 (2012).
- [19] L. M. Robledo, T. R. Rodríguez, and R. R. Rodríguez-Guzmán, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* **46**, 013001 (2018).
- [20] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Phys. Rev. C* **73**, 034308 (2006).
- [21] J. M. Yao, E. F. Zhou, and Z. P. Li, *Phys. Rev. C* **92**, 041304 (2015).
- [22] M. Borrajo and J. L. Egido, *Phys. Rev. C* **98**, 044317 (2018).
- [23] M. Borrajo, T. R. Rodríguez, and J. Luis Egido, *Physics Letters B* **746**, 341 (2015).
- [24] G. Gamow, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A* **126** (1930).
- [25] C. Weizsäcker, *Z. Physik* **96**, 431 (1935).
- [26] J. R. Nix and W. J. Swiatecki, *Nuclear Physics* **71**, 1 (1965).
- [27] S. R. Morris S., *Nature* **211**, 624 (1966).
- [28] E. Fermi, *Z. Physik* **36**, 902–912 (1926).
- [29] M. G. Mayer, *Phys. Rev.* **74**, 235 (1948).
- [30] M. G. Mayer, *Phys. Rev.* **75**, 1969 (1949).
- [31] O. Haxel, J. H. D. Jensen, and H. E. Suess, *Phys. Rev.* **75**, 1766 (1949).
- [32] K. S. Krane, *Introductory nuclear physics*, Wiley, New York, NY, 1988.

- 
- [33] P. Navrátil, S. Quaglioni, I. Stetcu, and B. R. Barrett, *Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics* **36**, 083101 (2009).
- [34] B. Wildenthal, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **11**, 5 (1984).
- [35] E. Caurier, shell model code antoine, 1989-2004.
- [36] E. Caurier and F. Nowacki, *Acta Physica Polonica Series B* **30**, 705 (1999).
- [37] B. Brown et al., MSU-NSCL Report No. 524 (1985).
- [38] C. W. Johnson, W. E. Ormand, and P. G. Krastev, *Comput. Phys. Commun.* **184**, 2761 (2013).
- [39] L. P. Kadanoff, *Journal of Statistical Physics* **137**, 777 (2009).
- [40] T. R. R. Frutos, *Estudio de las técnicas de proyección en teorías de muchos cuerpos*, Master's thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2004.
- [41] T. R. R. Frutos, *Estudio de núcleos exóticos con teorías más allá de campo medio*, PhD thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2007.
- [42] K. Hadyńska-Klęk et al., *Phys. Rev. Lett.* **117**, 062501 (2016).
- [43] B. Bounthong, PhD thesis, Université de Strasbourg, 2016.
- [44] H. Yukawa, *Proc. Phys. Math. Soc. Jap.* **17**, 48 (1935).
- [45] M. Naghdi, *Phys. Part. Nucl.* **45**, 924 (2014).
- [46] L. R. Dodd, *Phys. Rev. C* **18**, 2796 (1978).
- [47] J. Carlson, V. Pandharipande, and R. Wiringa, *Nuclear Physics A* **401**, 59 (1983).
- [48] R. Machleidt and F. Sammarruca, *Phys. Scripta* **91**, 083007 (2016).
- [49] E. Epelbaum, H. Krebs, and P. Reinert, *Frontiers in Physics* **8**, 98 (2020).
- [50] A. Ekström, *Frontiers in Physics* **8**, 29 (2020).



- 
- [51] S.-O. Bäckman, G. Brown, and J. Niskanen, *Physics Reports* **124**, 1 (1985).
- [52] T. Duguet and G. Hagen, *Phys. Rev. C* **85**, 034330 (2012).
- [53] U. Schollwöck, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
- [54] K. Tsukiyama, S. K. Bogner, and A. Schwenk, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 222502 (2011).
- [55] H. Hergert, *Phys. Scripta* **92**, 023002 (2017).
- [56] B. S. Pudliner, V. R. Pandharipande, J. Carlson, and R. B. Wiringa, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 4396 (1995).
- [57] H. Shi and S. Zhang, *Phys. Rev. B* **95**, 045144 (2017).
- [58] B. A. Brown and W. A. Richter, *Phys. Rev. C* **74**, 034315 (2006).
- [59] X. Wang and G. DONG, *Science China: Physics, Mechanics and Astronomy* **58** (2015).
- [60] A. F. Lisetskiy, B. A. Brown, M. Horoi, and H. Grawe, *Phys. Rev. C* **70**, 044314 (2004).
- [61] T. Skyrme, *Nuclear Physics* **9**, 615 (1958).
- [62] Y. Gambhir and A. Bhagwat, *Physics of Particles and Nuclei* **37**, 194 (2006).
- [63] B. Bally, A. Sánchez-Fernández, and T. R. Rodríguez, (2020).
- [64] J. J. Griffin and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **108**, 311 (1957).
- [65] D. L. Hill and J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **89**, 1102 (1953).
- [66] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Phys. Rev.* **108**, 1175 (1957).
- [67] J. Valatin, *Nuovo Cim.* **7**, 843 (1958).
- [68] N. N. Bogoljubov, V. V. Tolmachov, and D. V. Širkov, *Fortschritte der Physik* **6**, 605 (1958).

- 
- [69] E. Bender, K. Schmid, and A. Faessler, Nuclear Physics A **596**, 1 (1996).
- [70] B. Banerjee, P. Ring, and H. Mang, Nucl. Phys. A **221**, 564 (1974).
- [71] B. Bally, *Description of odd-mass nuclei by multi-reference energy density functional methods*, Theses, Université de Bordeaux, 2014.
- [72] T. Duguet, P. Bonche, P. Heenen, and J. Meyer, Physical Review C **65** (2001).
- [73] N. Schunck et al., Physical Review C **81**, 024316 (2010).
- [74] T. R. Rodríguez and J. L. Egidio, Phys. Rev. C **81**, 064323 (2010).
- [75] I. Talmi, *Simple Models of Complex Nuclei*, Beitrage Zur Wirtschaftsinformatik, Taylor & Francis, 1993.
- [76] N. Hinohara and J. Engel, Phys. Rev. C **90**, 031301 (2014).
- [77] H. Zduńczuk, W. Satuła, J. Dobaczewski, and M. Kosmulski, Phys. Rev. C **76**, 044304 (2007).
- [78] J. L. Egidio, M. Borrajo, and T. R. Rodríguez, Phys. Rev. Lett. **116**, 052502 (2016).
- [79] D. Thouless, Nucl. Phys. **21**, 225 (1960).
- [80] T. R. Rodríguez, J. L. Egidio, L. M. Robledo, and R. Rodríguez-Guzmán, Phys. Rev. C **71**, 044313 (2005).
- [81] A. Romero, J. Dobaczewski, and A. Pastore, Physics Letters B **795**, 177 (2019).
- [82] Z.-C. Gao, M. Horoi, and Y. S. Chen, Phys. Rev. C **92**, 064310 (2015).
- [83] V. Fomenko, J. Phys. (G.B) A **3** (1970).
- [84] K. Hara and S. Iwasaki, Nuclear Physics A **332**, 61 (1979).
- [85] M. Anguiano, J. Egidio, and L. Robledo, Nuclear Physics A **696**, 467 (2001).
- [86] L. M. Robledo and G. F. Bertsch, Phys. Rev. C **84**, 014312 (2011).

- 
- [87] J. Egido, J. Lessing, V. Martin, and L. Robledo, *Nuclear Physics A* **594**, 70 (1995).
- [88] W. Ryssens, M. Bender, and P. Heenen, *The European Physical Journal A* **55** (2019).
- [89] D. A. Varshalovich, A. N. Moskalev, and V. K. Khersonskii, *Quantum Theory of Angular Momentum*, World Scientific, Singapore, 1988.
- [90] M. B. Vázquez, *Description of odd-mass nuclei in Beyond Mean Field approaches with the Gogny density functional*, PhD thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2017.
- [91] N. Onishi and S. Yoshida, *Nuclear Physics* **80**, 367 (1966).
- [92] G. F. Bertsch and L. M. Robledo, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 042505 (2012).
- [93] B. Avez and M. Bender, *Phys. Rev. C* **85**, 034325 (2012).
- [94] R. Balian and E. Brézin, *Il Nuovo Cimento B (1965-1970)* **64**, 37 (1969).
- [95] M. Jensen, *Computational Physics*, CreateSpace Independent Publishing Platform, 2015.
- [96] B. Bally and M. Bender, *Phys. Rev. C* **103**, 024315 (2021).
- [97] T. R. Rodríguez, A. Poves, and F. Nowacki, *Phys. Rev. C* **93**, 054316 (2016).
- [98] B. Bally, A. Sánchez-Fernández, and T. R. Rodríguez, *Phys. Rev. C* **100**, 044308 (2019).
- [99] R. Rodríguez-Guzmán, J. Egido, and L. Robledo, *Nuclear Physics A* **709**, 201 (2002).
- [100] E. Wigner, *Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren*, Die Wissenschaft : Sammlung von Einzelerstellungen aus den Gebieten der Naturwissenschaft und der Technik, Vieweg, 1931.
- [101] C. Eckart, *Rev. Mod. Phys.* **2**, 305 (1930).

- 
- [102] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus: Concepts of Microscopic Nuclear Theory*, Theoretical and Mathematical Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [103] V. Vijayan, Beta-decay rates computed with variational approaches in shell model valence spaces, Master's thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2019.
- [104] F. Didierjean and G. Walter, (1994).
- [105] S. Kerrouchi, N. H. Allal, M. Fellah, and M. R. Oudih, *Int. J. Mod. Phys. E* **24**, 1550014 (2015).
- [106] B. Singh, J. L. Rodriguez, S. S. Wong, and J. K. Tuli, *Nuclear Data Sheets* **84** (1998).
- [107] F. T. Avignone, S. R. Elliott, and J. Engel, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 481 (2008).
- [108] J. Kotila and F. Iachello, *Phys. Rev. C* **85**, 034316 (2012).
- [109] S. M. Bilenky and C. Giunti, *International Journal of Modern Physics A* **30**, 1530001 (2015).
- [110] T. R. Rodríguez and G. Martínez-Pinedo, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **66**, 436 (2011), Particle and Nuclear Astrophysics.
- [111] C. F. Jiao, M. Horoi, and A. Neacsu, *Phys. Rev. C* **98**, 064324 (2018).
- [112] R. A. Sen'kov and M. Horoi, *Phys. Rev. C* **88**, 064312 (2013).
- [113] J. D. Vergados, H. Ejiri, and F. Šimkovic, *Reports on Progress in Physics* **75**, 106301 (2012).
- [114] C. F. González, Estudio del método variacional mediante la varianza de la energía, Master's thesis, Universidad Autónoma de Madrid, 2021.
- [115] M. Anguiano, J. Egido, and L. Robledo, *Physics Letters B* **545**, 62 (2002).
- [116] B. Bally and M. Bender, *Phys. Rev. C* **103**, 024315 (2021).
- [117] H. Flocard and N. Onishi, *Annals of Physics* **254**, 275 (1997).

- 
- [118] J. Engel, S. Pittel, M. Stoitsov, P. Vogel, and J. Dukelsky, *Phys. Rev. C* **55**, 1781 (1997).
- [119] M. Dufour and A. P. Zuker, *Phys. Rev. C* **54**, 1641 (1996).
- [120] K. HARA and Y. SUN, *International Journal of Modern Physics E* **04**, 637 (1995).
- [121] F.-Q. Chen and J. L. Egidio, *Phys. Rev. C* **93**, 064313 (2016).
- [122] F.-Q. Chen and J. L. Egidio, *Phys. Rev. C* **95**, 024307 (2017).
- [123] N. L. Vaquero, J. L. Egidio, and T. R. Rodríguez, *Phys. Rev. C* **88**, 064311 (2013).
- [124] T. Nikšić, D. Vretenar, and P. Ring, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **66**, 519 (2011).
- [125] J. L. Egidio, *Physica Scripta* **91**, 073003 (2016).
- [126] X. Wu, Z. H. Zhang, J. Y. Zeng, and Y. A. Lei, *Phys. Rev. C* **83**, 034323 (2011).
- [127] J. L. Egidio and M. Borrajo, *EPJ Web Conf.* **178**, 02002 (2018).
- [128] A. V. Afanasjev, *Isoscalar and Isovector Neutron-Proton Pairing*, pages 138–153, World Scientific, 2013.
- [129] S. Frauendorf and A. Macchiavelli, *Progress in Particle and Nuclear Physics* **78**, 24 (2014).
- [130] A. Poves and G. Martinez-Pinedo, *Physics Letters B* **430**, 203 (1998).
- [131] E. Majorana and L. Maiani, *A symmetric theory of electrons and positrons*, pages 201–233, Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2006.
- [132] A. Giuliani and A. Poves, *Advances in High Energy Physics* **2012** (2012).
- [133] M. Agostini et al., *Science* **365**, 1445 (2019).

- 
- [134] J. Engel and J. Menéndez, Reports on Progress in Physics **80**, 046301 (2017).
- [135] M. Horoi and A. Neacsu, Phys. Rev. C **93**, 024308 (2016).
- [136] J. Menéndez, A. Poves, E. Caurier, and F. Nowacki, Nuclear Physics A **818**, 139 (2009).
- [137] Y. Iwata et al., Phys. Rev. Lett. **116**, 112502 (2016).
- [138] L. Coraggio, A. Gargano, N. Itaco, R. Mancino, and F. Nowacki, Phys. Rev. C **101**, 044315 (2020).
- [139] E. Caurier, J. Menéndez, F. Nowacki, and A. Poves, Phys. Rev. Lett. **100**, 052503 (2008).
- [140] F. Šimkovic, V. Rodin, A. Faessler, and P. Vogel, Phys. Rev. C **87**, 045501 (2013).
- [141] D.-L. Fang, A. Faessler, and F. Simkovic, Phys. Rev. C **92**, 044301 (2015).
- [142] M. T. Mustonen and J. Engel, Phys. Rev. C **87**, 064302 (2013).
- [143] N. L. Vaquero, T. R. Rodríguez, and J. L. Egidio, Phys. Rev. Lett. **111**, 142501 (2013).
- [144] J. Menéndez, N. Hinohara, J. Engel, G. Martínez-Pinedo, and T. R. Rodríguez, Phys. Rev. C **93**, 014305 (2016).
- [145] J. Menéndez, T. R. Rodríguez, G. Martínez-Pinedo, and A. Poves, Phys. Rev. C **90**, 024311 (2014).
- [146] J. M. Yao, J. Engel, L. J. Wang, C. F. Jiao, and H. Hergert, Phys. Rev. C **98**, 054311 (2018).
- [147] C. F. Jiao, J. Engel, and J. D. Holt, Phys. Rev. C **96**, 054310 (2017).
- [148] N. Hinohara and J. Engel, Phys. Rev. C **90**, 031301 (2014).
- [149] J. M. Yao et al., Phys. Rev. Lett. **124**, 232501 (2020).

- 
- [150] A. Poves, J. Sánchez-Solano, E. Caurier, and F. Nowacki, *Nuclear Physics A* **694**, 157 (2001).
- [151] H. C. Lee and K. Hara, *Phys. Rev. C* **3**, 325 (1971).
- [152] T. Duguet, P. Bonche, P.-H. Heenen, and J. Meyer, *Phys. Rev. C* **65**, 014311 (2001).
- [153] G. Racah, *Phys. Rev.* **63**, 367 (1943).
- [154] S. Frauendorf and J. A. Sheikh, *Physica Scripta* **T88**, 162 (2000).
- [155] D. R. Goosman and D. E. Alburger, *Phys. Rev. C* **7**, 2409 (1973).
- [156] A. Sánchez-Fernández, B. Bally, and T. R. Rodríguez, en preparación, 2022.
- [157] A. Kumar, P. C. Srivastava, and T. Suzuki, *Progress of Theoretical and Experimental Physics* **2020** (2020), 033D01.
- [158] S. M. Obaid and H. M. Tawfeek, *Revista mexicana de física* **66**, 330 (2020).
- [159] R. Henning, *Reviews in Physics* **1**, 29 (2016).
- [160] F. Šimkovic, V. Rodin, A. Faessler, and P. Vogel, *Phys. Rev. C* **87**, 045501 (2013).
- [161] D. L. Fang, A. Faessler, and F. Simkovic, *Phys. Rev. C* **92**, 044301 (2015).
- [162] N. L. Vaquero, T. R. Rodriguez, and J. L. Egidio, *Physics Letters B* **704**, 520 (2011).
- [163] E. Baranger and Chong Wan Lee, *Nuclear Physics* **22**, 157 (1961).
- [164] W. Scheid and W. Greiner, *Annals of Physics* **48**, 493 (1968).
- [165] M. MacCormick and G. Audi, *Nuclear Physics A* **925**, 61 (2014).
- [166] P. Danielewicz and J. Lee, *Nuclear Physics A* **922**, 1 (2014).
- [167] X. Roca-Maza, H. Sagawa, and G. Colò, *Phys. Rev. C* **102**, 064303 (2020).

- [168] C. Qi, Theoretical nuclear physics, 2015.
- [169] B. A. Brown, Lecture notes in nuclear structure physics, 2005.
- [170] P. Brussaard and P. Glaudemans, *Shell-model applications in nuclear spectroscopy*, Elsevier, 1977.
- [171] J. A. Gaunt, Philos. Trans. Roy. Soc. London Ser. A **228**, 151 (1929).