

# Capítulo 1

## Introdução

1. A Física Nuclear é um dos compartimentos em que se pode hoje dividir a física da estrutura da matéria. Outros compartimentos: Física Molecular, Física Atômica e Física subnuclear (ou "Física de Partículas"; esta denominação parece ser uma abreviação de "Física das Partículas Elementares". No entanto, pode-se pensar também que, após desmoralizações sucessivas, a própria idéia de elementaridade retraiu-se. Especialmente quando entendida assim, desligada da idéia de elementaridade, a denominação Física de Partículas sugere adequadamente a postura típica do ramo: nele são moeda corrente observáveis expressos, em última análise, em termos de "partículas", entendidas estas como certas entidades "assintoticamente livres- parece que este tipo de liberdade chega a ter certa precedência sobre a elementaridade - que mergulham ou emergem de uma região de interação devidamente demarcada. Na medida em que algumas idéias e métodos da física de partículas tendem a se fundir mais ou menos coerentemente com a física nuclear, contribuindo assim para a formação do que está sendo identificado como física subnuclear, a predominância de tais considerações tende a ser pouco a pouco desfeita, enquanto a linguagem evolui de forma a abrir espaço para propriedades que não se resolvam inicial e finalmente em objetos livres. Dar exemplos!).

O tema deste curso é portanto o conjunto de fatos e idéias que são usados hoje para tratar a questão da estrutura da matéria ao nível nuclear. Enquanto as idéias são derivadas de teorias dinâmicas gerais (no caso, a Mecânica Quântica), os fatos são os ingredientes que realmente definem a área. Ao contrário do que eventualmente ocorre em um curso de Mecânica Quântica, por exemplo, em que fatos são usados com objetivos de motivação ou de ilustração, podendo ser substituídos mesmo por outros ligados a situações físicas inteiramente diferentes, aqui os fatos vão ter um papel definidor, e não apenas de coadjuvante.

2. Ordens de grandeza, e como os níveis vão se tornando menos distintos à medida que se desce para níveis mais microscópicos. Diferença entre o problema de um núcleo como sistema de muitos nucleons e o problema de um nucleon como sistema de muitos "subnucleons" (quarks?).

Diferença, ao nível subnuclear, dos problemas de "um" e "dois" nucleons (nêste caso existe uma forma de separar o sistema em dois pedaços que é inacessível a um único nucleon).

## Capítulo 2

# Fenomenologia de tamanhos e massas nucleares

O espalhamento elástico de electrons é o método mais preciso de que se dispõe hoje para medir a distribuição de carga de um núcleo estável. Esta restrição exclui o caso de núcleos afastados do vale de estabilidade (v. discussão abaixo) que, embora estáveis do ponto de vista das interações fortes, têm meias vidas muito curtas para decaimento beta. Ela permite, no entanto, o conhecimento detalhado até mesmo de inhomogeneidades na distribuição de carga que são específicas de uma determinada espécie nuclear (associadas e.g. a efeitos de partícula independente, v. Ref... et al. Phys. Rev. Lett. **xxx**, xxxx (1992)) e também, por outro lado, uma visão nítida das propriedades médias da distribuição de carga de núcleos estáveis “normais”. Uma propriedade importante dos electrons para esse tipo de medida é a sua imunidade à interação forte, pois isso reduz a importância de processos de absorção do feixe de prova pelo meio nuclear, permitindo a exploração de todo o volume do núcleo, e não apenas de uma camada superficial como acontece nos casos em que são usados projéteis que interagem fortemente com os nucleons.

### 2.1 Aproximação de Born e Regra Áurea de Fermi

O que segue é um tratamento muito simplificado do espalhamento de electrons com vistas ao seu uso para a medida de distribuições de carga nucleares. Ele é baseado na aproximação de Born, que consiste em tratar os estados inicial e final do electron como ondas planas (i.e., correspondendo a electrons livres) e as transições entre diferentes momentos produzidas pela distribuição de cargas a estudar em primeira ordem de teoria de perturbações através da “regra áurea” de Fermi. Outra simplificação que será feita é a de considerar infinita a massa do núcleo

espalhados frente à massa do electron, de forma a poder ignorar efeitos de recuo do alvo. Dessa forma, o momento final  $\vec{k}_f$  do electron vai diferir do momento inicial  $\vec{k}_i$  apenas por ter sofrido um desvio  $\theta$  em relação à sua direção inicial. Portanto

$$\vec{k}_i \cdot \vec{k}_f = k^2 \cos(\theta), \quad k = |\vec{k}_i| = |\vec{k}_f|.$$

Uma quantidade importante é o *momento transferido*  $\vec{q}$ , definido como

$$\vec{q} = \vec{k}_f - \vec{k}_i$$

cujos módulo  $q$  se relaciona com o ângulo de espalhamento  $\theta$  através da relação

$$q = 2k \sin(\theta/2)$$

que pode ser verificada geometricamente de forma imediata.

A probabilidade de transição por unidade de tempo  $W$ , de  $\vec{k}_i$  para uma determinada faixa de momentos finais  $\{\vec{k}_f\}$ , é dada em primeira ordem de teoria de perturbação por

$$W = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\{\vec{k}_f\}} |\langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle|^2 \delta(E_i - E_f) \quad (2.1)$$

onde o elemento de matriz se escreve explicitamente como

$$\langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \int d\vec{r} V(\vec{r}) \exp i(\vec{k}_i - \vec{k}_f) \cdot \vec{r}. \quad (2.2)$$

Aqui  $V(\vec{r})$  é o potencial eletrostático associado à distribuição de carga do núcleo. Supondo por simplicidade que esse potencial seja esfericamente simétrico, isto é,  $V(\vec{r}) = V(r)$  com  $r = |\vec{r}|$ , é possível fazer as integrais angulares com o resultado

$$\langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle \rightarrow \frac{4\pi}{\mathcal{V}} \int_0^\infty dr r^2 \frac{\sin(qr)}{qr} V(r).$$

Nessas expressões foram usados para os electrons ondas planas satisfazendo condições de contorno periódicas e normalizadas num volume  $\mathcal{V}$ , como um procedimento conveniente para evitar problemas técnicos com estados de norma infinita.

Uma tentativa de cálculo da última expressão no caso simples do potencial de uma carga puntiforme,  $V(r) = Ze^2/r$ , esbarra em problemas de convergência da integração quando  $r \rightarrow \infty$ . A forma usual de contornar esta particular falta de convergência consiste em considerar em vez desse potencial, o potencial “blindado”

$$V(r) = \frac{Ze^2}{r} e^{-\lambda r}$$

que dá o resultado

$$\frac{4\pi}{\mathcal{V}} \frac{Ze^2}{q^2 + \lambda^2}$$

cujos limites para  $\lambda \rightarrow \infty$  é bem comportado e igual a  $(4\pi/\mathcal{V})(Ze^2/q^2)$ . Levando esse resultado à expressão para a probabilidade de transição  $W$ , fixando a direção dos electrons espalhados (ou, equivalentemente, o ângulo de espalhamento  $\theta$  e a energia incidente) e lembrando que a secção de choque é definida como a probabilidade de transição por unidade de tempo *por unidade de fluxo incidente*, resulta, para uma carga puntiforme

$$\frac{d\sigma_c}{d\Omega_f} = \frac{Z^2 e^4}{4E^2} \frac{1}{\sin^4 \frac{\theta}{2}}.$$

Para obter esse resultado as energias inicial e final,  $E_i$  e  $E_f$  foram calculadas no limite ultra relativístico que consiste em desprezar a energia de repouso do electron, escrevendo  $E \simeq \hbar kc$ . A validade dessa aproximação nas situações de interesse será discutida pouco adiante. Como esperado, e ao contrário da probabilidade de transição  $W$ , a secção de choque resulta independente do volume de quantização  $\mathcal{V}$ . Embora reproduzindo a fórmula clássica de Rutherford, essa expressão *não* descreve corretamente a secção de choque de espalhamento de electrons ultra relativísticos por uma carga puntiforme. A expressão correta para isso é

$$\frac{d\sigma_m}{d\Omega_f} = \frac{Z^2 e^4 \cos^2 \frac{\theta}{2}}{4E^2 \sin^4 \frac{\theta}{2}}$$

que difere da anterior pela dependência angular adicional no último fator. Esse fator provém de efeitos relativísticos associados ao spin do electron, que foi totalmente ignorado nesta discussão simplificada. De fato, nas condições do regime ultra relativístico o spin se alinha com o momento do electron, de modo que um desvio de um ângulo  $\theta$  no momento envolve também uma reorientação do spin desse mesmo ângulo, do que resulta esse fator adicional. Esta última expressão para a secção de choque é chamada secção de choque de Mott (o que justifica o índice  $m$  usado para ela).

## 2.2 Espalhamento por uma distribuição extensa de cargas

Neste caso é possível e conveniente reexpressar os elementos de matriz Eq. 2.2 diretamente em termos da densidade de carga  $\rho(r)$  utilizando a equação de Poisson. No caso de uma distribuição de cargas (e portanto também de um potencial) com simetria esférica essa equação dá

$$\nabla^2 V(r) = \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rV(r)] = 4\pi e \rho(r).$$

Integrando a Eq. 2.2 nas variáveis angulares (como anteriormente) e, em seguida, integrando por partes duas vezes, resulta

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle &= \frac{4\pi}{\mathcal{V}q} \int_0^\infty dr r V(r) \sin(qr) = -\frac{4\pi}{\mathcal{V}q^3} \int_0^\infty dr \frac{d^2}{dr^2} [rV(r)] \sin(qr) \\ &= -\frac{(4\pi)^2}{\mathcal{V}q^3} \int_0^\infty dr r \rho(r) \sin(qr). \end{aligned}$$

É conveniente ainda parametrizar a distribuição de cargas em termos de uma função  $f(r)$  definida, para um núcleo de carga  $Ze$ , através de

$$\rho(r) = Ze f(r)$$

de modo que  $\int d\vec{r} f(r) = 1$ . O que se obtém assim é

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_f | V | \vec{k}_i \rangle &= -\frac{4\pi Ze^2}{\mathcal{V}q^2} \times \frac{4\pi}{q} \int_0^\infty dr r f(r) \sin(qr) \\ &\equiv \frac{4\pi Ze^2}{\mathcal{V}q^2} \times F(q). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Este resultado difere daquele obtido para o caso de uma carga puntiforme apenas pelo fator  $F(q)$ , e portanto a secção de choque correspondente fica

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\sigma_m}{d\Omega} \times |F(q)|^2. \quad (2.4)$$

A determinação da distribuição de carga a partir de medidas da secção de choque elástica envolve portanto o problema de inverter a Eq. 2.4. Uma forma prática de tratar esse problema é simplesmente parametrizar  $f(r)$  de forma suficientemente flexível e ajustar os parâmetros

comparando o resultado do cálculo da Eq. 2.4 com os dados. É importante notar que o “fator de forma”  $F(q)$ , para valores pequenos de  $q$ , é insensível aos detalhes mais finos da distribuição  $f(r)$ . De fato, para um dado valor de  $q$ ,  $F(q)$  envolve uma integração dessa função em  $r$  com uma função peso oscilante com comprimento de onda  $2\pi/q$ , e essa integração na realidade suaviza qualquer estrutura espacial de  $f(r)$  em escalas mais finas que essa. Para atingir resoluções espaciais da ordem de  $\delta r$  é preciso então medir o fator de forma elástico  $F(q)$  até valores do momento transferido da ordem de  $2\pi/\delta r$ . Isso dá valores do momento transferido  $q$  da ordem de 1 GeV para  $\delta r$  da ordem de 1 fm, o que por sua vez implica na necessidade de feixes de electrons com energia da mesma ordem. Isso serve, em particular, para justificar a aproximação ultra-relativística utilizada para a cinemática do electron no cálculo da secção de choque, sendo a massa de repouso do electron 0.511 MeV.

## 2.3 Sistemática das distribuições de carga

Embora medidas cuidadosas da distribuição de cargas de núcleos específicos mostrem características individuais, ligadas em particulas à estrutura de camadas que será tratada adiante no contexto das massas nucleares, existe um comportamento médio que pode ser descrito de forma simples: a distribuição de carga de núcleos estáveis (no sentido prático de possibilitarem a fabricação de alvos para medidas de espalhamento elástico de electrons) tem um raio proporcional a  $A^{1/3}$  (onde  $A$  é o número de massa  $A = N + Z$ ) e uma superfície difusa de espessura essencialmente independente de  $A$ . Essa distribuição média é usualmente parametrizada por uma função  $f(r)$  dada por

$$f(r) = f_0 \left[ 1 + \exp \frac{r - c}{d} \right]^{-1} \quad (2.5)$$

onde  $c \simeq 1.07 \times A^{1/3}$  fm e  $d \simeq 0.55$  fm definem respectivamente o raio e a difusividade da distribuição. A constante  $f_0$  é fixada simplesmente por normalização, impondo que  $\int d\vec{r} f(r) = 1$ . De fato, é claro que para  $r = c$  o valor de  $f(r)$  se reduz a  $f_0/2$ . Além disso, um cálculo simples mostra que a espessura da superfície, definida como o intervalo de  $r$  em que  $f(r)$  cai de  $0.9 \times f_0$  até  $0.1 \times f_0$ , é  $s = 4.4d$ .

Não existem atualmente resultados diretos de precisão comparável a esses para a distribuição de neutrons nos mesmos núcleos. Evidências indiretas (como a diferença de energia entre núcleos espelho, ou a energia de estados isobaricamente análogos) sugerem que essa distribuição seja essencialmente igual à distribuição de carga. Tomando isso como hipótese, a proporcionalidade do raio com  $A^{1/3}$  (e portanto a proporcionalidade do volume a  $A$ ) dá uma indicação clara da saturação da matéria nuclear, pelo menos no que diz respeito à classe considerada de núcleos estáveis. Os parâmetros ajustados à Eq. 2.5 dão nessas condições uma densidade de saturação

de  $1.7 \times 10^{38}$  nucleons por  $\text{cm}^3$ , ou equivalentemente um volume de saturação por partícula de  $(1.8)^3 \text{ fm}^3/\text{nucleon}$ . Um campo de pesquisa hoje muito ativo, no entanto é o dos chamados “núcleos exóticos”, que estão muito afastados dos núcleos estáveis (por terem um excesso grande de neutrons ou de protons em relação a estes). Estes núcleos, embora estáveis no que diz respeito às forças nucleares, são bastante instáveis com relação ao decaimento beta (v. seção xx abaixo), e disponíveis apenas sob a forma de feixes secundários, resultantes da fragmentação de um feixe de núcleos estáveis devida a um primeiro processo de colisão. Alguns dos membros mais estudados dessa família, como o  $^{11}\text{Li}$  (com 8 neutrons) e o  $^{11}\text{Be}$  (com 7 neutrons) mostram uma distribuição de neutrons (determinada indiretamente através de colisões nucleares) com raio muito maior que raios de distribuições de carga típicos de núcleos vizinhos, e são por isso chamados núcleos com “halo” de neutrons. Os problemas de estrutura nuclear desses “núcleos exóticos” estão ainda longe de serem razoavelmente compreendidos.

## 2.4 Massas nucleares: organização usual da base de dados

As massas dos núcleos diferem da soma das massas de seus constituintes (tomados como protons e neutrons) devido a efeitos dinâmicos de ligação, de acordo com o resultado relativístico geral (e famoso!)  $E = mc^2$ . Aqui esse resultado deve ser entendido sob a forma Energia de ligação = (massa total dos constituintes - massa do núcleo) $c^2$ . Isso *inclui* efeitos dinâmicos que porventura alterem a estrutura interna (subnuclear) dos constituintes quando ligados no agregado nuclear. Uma hipótese (muitas vezes apenas implícita) em um grande número de descrições teóricas de questões de estrutura nuclear é a de que tais efeitos subnucleares ou não existem ou são quantitativamente desprezíveis. As propriedades nucleares usualmente estudadas são (digamos, por cautela, com no máximo pouquíssimas excessões) no mínimo não incompatíveis com essa hipótese. Aqui deve-se ter em conta, porém, as limitações existentes para se extrair resultados quantitativos precisos de teorias quânticas de muitos corpos. (Uma suposta excessão, por exemplo, tem a ver com pequenas ”anomalias” nos raios de núcleos espelho, i.e. mesmo número de massa  $A$ , mas número de protons do primeiro igual ao número de neutrons do segundo). É um fato que a existência de uma dinâmica subnuclear por si só implica, em princípio, na existência de tais efeitos. A questão que permanece relativamente no escuro tem a ver porém não com tal questão de princípio, mas com a natureza precisa e a magnitude dos efeitos subnucleares.

Apresentação usual dos dados: Massas *atômicas* (átomos neutros) tabuladas *por espécie nuclear* (caracterizada pela carga  $Z$  e pelo número de neutrons  $N$ ) em termos de uma quantidade chamada ”deficiência de massa”  $\Delta$  definida como  $\Delta = M - A$ , onde  $A$  é  $N + Z$  e  $M$  é a massa atômica em questão medida em unidades tais que *por definição*  $\Delta = 0$  para o átomo neutro de

$^{12}\text{C}$  no seu estado fundamental (UAM, "unidades atômicas de massa").

Tais massas incluem, portanto  $Z$  massas eletrônicas (para um núcleo de carga  $Z$ ) bem como a energia de ligação dos electrons no átomo. Esta última resulta também de efeitos complicados de uma dinâmica de muitos corpos, mas é confortavelmente exprimível em electronvolts, enquanto que os efeitos nucleares de ligação devem ser expressos em milhões de electronvolts. Para extrair desses tabulações atômicas massa nucleares é usual, portanto, ignorar os efeitos de ligação dos electrons. (Exemplos).

Panorama geral das massas nucleares: energia de ligação nuclear grosseiramente proporcional ao número de massa  $A$  (7-8 MeV/ $A$ ; de novo evidência para a ocorrência de saturação). Existem no entanto variações importantes não tanto em termos quantitativos como pelo seu caráter sistemático: decréscimo para núcleos tanto mais leves quanto mais pesados que o Fe; oscilações sistemáticas em determinados intervalos de  $N$  e  $Z$ . Variações do primeiro desses dois tipos ("efeitos de gota") podem ser descritas fenomenologicamente de forma extremamente econômica e precisa por fórmulas semi-empíricas de massa. As variações do segundo tipo refletem propriedades mais "personalizadas" de cada uma das diferentes espécies nucleares ("efeitos de camada") e pedem tratamento um tanto mais microscópico.

A partir de 1966 consolidaram-se esforços no sentido de construir formulas de massa que dessem conta dessas duas classes de efeitos. Esses esforços inicialmente bifurcaram-se numa linha de extrema transparência mas bastante heurística no tratamento dos efeitos de camada (Myers e Swiatecki) por um lado; e numa linha bastante menos transparente mas muito mais precisa e específica no tratamento desse mesmos efeitos (Strutinski). Atualmente utiliza-se de forma praticamente exclusiva versões sofisticadas do método de Strutinski para o tratamento de efeitos de camada. Como as idéias básicas podem ser explicadas em qualquer dos métodos, por razões pedagógicas segue uma apresentação na linha de Myers e Swiatecki. Esta linha perdeu a parada no que se refere aos efeitos de camada, mas seus desenvolvimentos dominam a linguagem de hoje no que se refere a refinamentos no tratamento dos efeitos de gota.

## 2.5 Fórmula de massa segundo Myers e Swiatecki

Referências: Nucl. Phys. **81** (1966),1; Ark. Fys. **36** (1967), 343.

Constituintes; volume e superfície com a respectiva estrutura de simetria; Coulomb (com a respectiva correção leptodérmica); emparelhamento (efeito idiosincrático geral de natureza microscópica). Parâmetros ajustados, qualidade do ajuste, caráter sistemático das discrepâncias (efeitos de camada).

**Discussão dos efeitos de gota carregada e tratamento heurístico dos efeitos de camada.** A parte de variação suave da dependência das energias de ligação por nucleon com a espécie nuclear é bem descrita em termos de uma combinação de efeitos de volume, superfície,

carga (repulsão Coulombiana) e simetria (dependência com  $(N - Z)^2$ ). Os  *fatos*  centrais ligados a essa combinação são: a) o máximo largo da energia de ligação por partícula na região do Fe; e b) o desvio do vale de estabilidade para o lado rico em neutrons à medida que  $A$  aumenta. O ponto a) se liga diretamente às instabilidades por fusão e por fissão respectivamente de núcleos mais leves e mais pesados que o Fe. (Exemplos: Instabilidade de moléculas como  $^{14}\text{N}_2$  ou  $^{16}\text{O}_2$  que são “estados excitados” de átomos de  $^{28}\text{Si}$  e de  $^{32}\text{S}$  respectivamente; instabilidade por fissão de estanho e chumbo, por exemplo. Produção nestes processos de fissão de fragmentos leves que tendem a ser ricos em neutrons). Instabilidade beta e o vale dos núcleos estáveis. (Instabilidade nuclear vs. beta. -j aula 4)

Extrapolação das energias de ligação conhecidas para as regiões extremamente ricas em neutrons (“linhas de gotejamento de neutrons/protons” (neutron/proton drip lines)). Dependência suave destas linhas com  $N$  e  $Z$ , *a menos de efeitos do termo de emparelhamento*, que é a rigor apenas uma primeira correção devida a propriedades da estrutura específica de núcleos individuais (notadamente as correções de camada). Exemplo de efeito de emparelhamento na neutron drip line: estabilidade nuclear do  $^{11}\text{Li}$  e do  $^9\text{Li}$  e não estabilidade do  $^{10}\text{Li}$ . (Caráter borromeano do  $^{11}\text{Li}$ ); como  $^{11}\text{Be}$  também é estável o  $^{11}\text{Li}$  não é uma ilha, mas um recorte na península de núcleos estáveis.

Efeitos de camada: relação com dinâmica de fermions independentes (ou pelo menos “quase independentes”) e confinados via agrupamentos em energia de estados de um fermion mais limitações de disponibilidades determinadas pelo princípio de exclusão. Tratamento Myers-Swiatecki, idéia do método “macroscópico-microscópico” para resolver os problemas da precisão necessária. Strutinski: níveis mais realísticos, problema de determinar a subtração suave para viabilizar o método macroscópico-microscópico. Vantagens no tratamento de efeitos de deformação.

Fórmula de massa 1992 de Möller et al. Vale de estabilidade (ou península de energia de ligação) com efeitos de camada. Estrutura das linhas de gotejamento (importancia para o problema da nucleossíntese estelas dos elementos mais pesados que o Fe.

## 2.6 Instabilidade beta

Caso “elementar”: decaimento beta do neutron. Balanço de energia no decaimento por emissão de electrons (supondo neutrinos de massa zero!):

$$M_n(N, Z) > M_n(N - 1, Z + 1) + m_e.$$

Isso pode ser posto em termos de massas atômicas e de deficiências de massa  $\Delta$ :

$$(N + Z) + \Delta(N, Z) - Zm_e > (N + Z) + \Delta(N - 1, Z + 1) - (Z + 1)m_e - m_e.$$

As massas eletrônicas se cancelam assim como  $(N+Z)$ , de modo que o decaimento é energeticamente possível se  $\Delta(N, Z) > \Delta(N - 1, Z + 1)$ . Para a emissão de positron:

$$M_n(N, Z) > M_n(N + 1, Z - 1) + m_e$$

Pondo tudo em termos de deficiências de massa resulta que este processo é energeticamente permitido quando  $\Delta(N, Z) > \Delta(N + 1, Z - 1) + 2m_e$  (é necessário um saldo livre de 1.022 MeV). Este processo compete em geral com o processo de captura de electrons (atômicos), que é no entanto menos exigente em termos de diferenças de massa:

$$m_e + M_n(N, Z) > M_n(N + 1, Z - 1)$$

o que pode ocorrer sempre que  $\Delta(N, Z) > \Delta(N + 1, Z - 1)$ . Em *todos* os casos acima a energia excedente é carregada pelos neutrinos ou anti-neutrinos associados aos processos.

Processos de decaimento beta tendem a concentrar as espécies nucleares naturais apenas às vizinhanças mais imediatas do vale de estabilidade. As vidas médias associadas aos decaimentos tendem a diminuir com o maior afastamento do vale de estabilidade devido à tendência que a energia disponível tem de aumentar com esse afastamento. (Há outros fatores cruciais, porém, ligados à estrutura dos núcleos inicial e final envolvidos!).

# Capítulo 3

## Abundâncias nucleares e nucleossíntese

Tres números básicos:  $X \leq 0.73$ ;  $0.30 \geq Y \geq 0.25$ ;  $Z \leq 0.02$ .  $X$ =fração de massa correspondente a hidrogênio;  $Y$ =fração de massa correspondente a  $Z=2$ ;  $Z$ =resto. A distribuição de  $Z$  pelos vários elementos (mais pesados que He) apresenta uma estrutura rica e significativa. Sistemas astrofisicamente mais novos tendem a ser ligeiramente mais ricos em elementos mais pesados, sem no entanto fugir significativamente desse quadro geral de tres números.

Cenários para a produção desse estado de coisas: 1) Nucleossíntese primordial, nos primeiros minutos do universo do “big bang”, para a produção de algumas espécies mais leves, e particularmente de praticamente todo o He; 2) Nucleossíntese estelar, para os elementos do grupo  $Z$ , através de processos de fusão (para núcleos até os da região do Fe) e de outras formas de acreção de nucleons (notadamente captura de neutrons). Tanto o universo muito jovem como o interior de estrelas funcionam como laboratórios nucleares difusos e em grande escala. Os processos fundamentais são reações nucleares que ocorrem aleatoriamente entre fragmentos agitados termicamente por altas temperaturas. Escala térmica de energias: estabelecida via constante de Boltzmann,  $k = 8.62 \times 10^{-5} \text{ eV}/^{\circ}\text{K}$ . Valor de massas e energias notáveis em  $^{\circ}\text{K}$ . Notação  $T_n$  para as ordens de grandeza na escala térmica de energias. (Exemplo:  $m_e = 5.93T_9$ , relacionada com condições iniciais para a nucleossíntese primordial).

### 3.1 Descrição dos processos nucleares em meios difusos e quentes

$N_i$  = número de núcleos tipo  $i$  por unidade de volume. Aumento de  $N_i$ : processos tipo  $j + k \rightarrow i + \dots$ . Redução de  $N_i$ : processos tipo  $i + j \rightarrow \text{não } i$

Equações para os  $N_i$  como funções do tempo podem ser escritas em termos de taxas de reação

que podem ser expressas em termos de secções de choque:

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum'_{j,k} N_j N_k \langle \sigma v \rangle_{jk;i} - \sum_l N_i N_l \langle \sigma v \rangle_{il;\bar{i}}.$$

Na primeira soma  $i$  é excluído como estado inicial, na segunda como estado final. Os sumandos nos dois termos são taxas médias de reação que podem ser expressas em termos de secções de choque. Variáveis alternativas:

$$X_i = \frac{N_i M_i}{\sum_j N_j M_j}.$$

$X_i$  é a fração da densidade total que está sob a forma  $i$ :  $M_i$  é a massa da espécie  $i$  e  $\sum_i X_i = 1$ ; chamando  $\sum_i N_i M_i = \rho_b$ , densidade bariônica total (massa/volume),  $X_i = N_i M_i / \rho_b \equiv Y_i M_i$  de modo que

$$Y_i = \frac{N_i}{\rho_b} = \frac{X_i}{M_i}.$$

Em termos dessas variáveis  $N_i = Y_i \rho_b$  e as equações ficam

$$\frac{dY_i}{dt} = \sum'_{j,k} Y_j Y_k \rho_b \langle \sigma v \rangle_{jk;i} - \sum_l Y_i Y_l \rho_b \langle \sigma v \rangle_{il;\bar{i}}.$$

Relação entre as taxas de transição por unidade de volume  $dN_i/dt$  e secções de choque:  $\sigma_{jk;i}$  = taxa de transição / (número de alvos  $\times$  fluxo incidente). Mas fluxo incidente = (número de projeteis  $\times v$ ) / volume. Portanto taxa de transição por unidade de volume =  $\sigma_{jk;i} \times v \times$  (número de projeteis/volume)  $\times$  (número de alvos/volume), de acordo com a forma dos sumandos das equações diferenciais para as taxas. No meio térmico os produtos  $\sigma v$  devem ser substituídos por seu valor médio na distribuição térmica de velocidades *relativas* (em geral  $\sigma = \sigma(v)$ !). Essa distribuição (temperaturas altas) é uma distribuição de Boltzmann:

$$\phi(\vec{v}) = \left(\frac{\mu}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp -\frac{\mu v^2}{2kT}$$

onde  $\mu$  é a massa reduzida do par projétil-alvo. Isso dá

$$\langle \sigma v \rangle_{jk;i} = 4\pi \left(\frac{\mu}{2\pi kT}\right)^{3/2} \int_0^\infty dv \sigma_{jk;i}(v) v^3 \exp -\frac{\mu v^2}{2kT}$$

Exemplo: calculo de D. N. Schramm e R. V. Wagoner, Ann. Rev. Nucl. Sci. **27** (1977) 37 para a nucleossíntese no universo primordial. Observação: apenas colisões binárias foram consideradas neste tratamento. Isso se justifica desde que a densidade  $\rho_b$  seja suficientemente baixa, o que ocorre de fato e.g. no caso do cálculo de Schramm e Wagoner.

## 3.2 Processos nucleares astrofísicos

Referências:

1. Donald D. Clayton, *Principles of stellar evolution and nucleosynthesis*, McGraw-Hill 1968 (Existe uma edição bem mais recente; V. esp. Caps. 3, 4 e 5 da edição de 68).
2. Virginia Trimble, *Revs. Mod. Phys.* **47**, 884 (1975).
3. H. Reeves, *Role of Nuclear Reactions in the Evolution of the Galaxy*, Escola Enrico Fermi (Varenna) Curso LIII (1972), Academic Press 1973.

O ponto de partida para a nucleossíntese primordial foi um meio ainda rico em *neutrons*, que finalmente se combinaram com um número suficiente de prótons produzindo essencialmente todo o He hoje existente (além de traços de outros elementos leves). A situação inicial num meio estelar, fortemente dominado em sua constituição por prótons (hidrogênio), exige a consideração de outros processos nucleares para dar conta do funcionamento da estrela. Processos envolvendo interações nucleares e eletromagnéticas (importância eventual destas para o descarte da energia de ligação nuclear liberada pelas reações!) não dão conta da situação: a) da interação (nuclear)  $p + p$  e  $p + {}^4\text{He}$  (que são os ingredientes mais abundantes) não resulta qualquer produto estável. Um processo exotérmico é  $p + {}^2\text{H} \rightarrow {}^3\text{He} + \gamma$ , mas a baixíssima abundância de deutério faz com que ele não possa ser importante, pelo menos quantitativamente. A solução tida hoje como adequada para esse problema foi proposta em 1939 por Hans Bethe (H. A. Bethe, *Phys.Rev.* **55**,103 (1939); *ibid.* 434 (1939)) e envolve de uma forma essencial interações *fracas* para a produção de deutério a partir de prótons:  $p + p \rightarrow {}^2\text{H} + e^+ + \nu$ .

Como as interações fracas tem alcance muito curto é preciso para que essa reação ocorra a aproximação dos prótons contra a tendência da barreira coulombiana. Isso exige temperaturas altas:

$$\frac{e^2}{d} = \frac{1.45}{d} \text{MeV} = \frac{1.68}{d} \times 10^{10} \text{ } ^0K$$

quando  $d$  é expressa em  $fm$ . Usando para  $d$   $1.6 fm$  ( $\sim 2 \times$  raio da distribuição de carga do próton) isso dá  $\sim 10^{10} \text{ } ^0K$ . Na realidade distâncias um pouco maiores são suficientemente eficientes, e tendo em conta a distribuição de velocidades (Boltzmann) resulta que a temperatura necessária para o funcionamento do processo está por volta dos  $10^7 \text{ } ^0K$ .

Ciclo pp e seu balanço de energia.

Papel de contaminantes pesados: ciclos “catalíticos” tipo CNO e suas variantes. Balanço de energia.

Queima do hélio e o problema da abundância do carbono. Ressonâncias e “picos de Gamow”.

Queima de oxigênio, produção de pares, luminosidade de neutrinos.

Pico do Fe: equilíbrio estatístico.

Núcleos mais pesados que o Fe: processo S e processo R.

## Capítulo 4

# Fenomenologia das forças nucleares e a matéria nuclear

No tratamento não relativístico de sistemas nucleares, a interação nuclear entre os nucleons constituintes é descrita por meio de um potencial de dois corpos que depende não só das posições de cada um dos nucleons mas também de suas variáveis de spin, e de seu momento relativo. Em muitos casos esta última dependência não é explícita, mas intervém de fato através de uma dependência do potencial com o momento angular relativo do par de nucleons, por exemplo. Essas complicações podem eventualmente ser vistas hoje como ligadas ao caráter não elementar dos nucleons. Elas representam na realidade uma parametrização, em termos das variáveis dinâmicas globais dos nucleons, do resultado de interações envolvendo graus de liberdade subnucleares não explicitados. Uma situação qualitativamente análoga a essa, e que conduz a resultados semelhantemente complicados, se encontra por exemplo na descrição de forças interatômicas em termos de variáveis dinâmicas associadas ao átomo como um todo, isto é, sem referência à existência do nucleon com seu campo Coulombiano, dos electrons, etc. Ao contrário deste caso, porém, para o qual existem tanto uma descrição dinâmica mais microscópica quanto a possibilidade de calcular suas consequências (o que é efetivamente feito no contexto da química quântica, por exemplo), no caso nuclear os tratamentos subnucleares têm ainda um caráter ainda apenas exploratório e/ou se amparam fortemente em simplificações quantitativamente pouco controláveis da dinâmica subnuclear.

Existem atualmente diversos potenciais fenomenológicos nucleon-nucleon, para os quais são utilizadas formas ou critérios de parametrização também diversos. Em todos os casos o valor dos parâmetros é ajustado a observáveis do sistema de dois corpos, que incluem as propriedades do deuteron e dados de espalhamento em energias de até algumas centenas de MeV. As diferentes formas dos potenciais, por outro lado, refletem diferenças entre esquemas teóricos e/ou intenções subjacentes. Idealmente, todos os potenciais fenomenológicos assim

determinados são equivalentes do ponto de vista que ajustam os dados experimentais referentes ao sistema de dois corpos. Isso *não* significa, contudo, que eles sejam equivalentes também do ponto de vista dos sistemas de muitos corpos. A razão disso é que as propriedades desses sistema envolvem processos de interação entre partículas que na realidade nunca estão assintoticamente livres, e esses processos não são unívocamente determinados pelos dados de espalhamento e pelas propriedades de um único estado ligado.

## 4.1 Propriedades gerais do potencial de dois corpos

Diversas características gerais do potencial nuclear de dois corpos são determinadas pelas propriedades do deuteron e por dados de espalhamento em energias baixas ( $E$  menor que cerca de 10 MeV no sistema de centro de massa). Algumas outras apenas aparecem através dos dados de espalhamento em energias mais altas (até cerca de 300 MeV no centro de massa).

### 4.1.1 Propriedades em baixas energias ( $E \leq 10$ MeV)

Um fato crucial é a existência de um único estado ligado para sistemas de dois nucleons. Ele envolve um próton e um nêutron ( $A = 2$ ,  $Z = 1$ ), tem energia de ligação 2.2 MeV, momento angular total e paridade  $J^\pi = 1^+$ . A paridade positiva implica que o momento angular orbital é *par*, e o valor de  $J$  restringe os valores possíveis a  $L = 0$  ou  $L = 2$ . Em ambos os casos é necessário que o spin total seja  $S = 1$ . A inexistência de um estado ligado com spin total  $S = 0$  no sistema nuclear de dois corpos revela que a interação *depende do spin* e deve ser menos ligante no estado singlete  $S = 0$  que no estado tripleto  $S = 1$ .

Devido à presença de efeitos centrífugos nas ondas parciais  $L \neq 0$  é natural esperar que o estado fundamental de um sistema de dois corpos interagindo através de forças centrais tenha  $L = 0$ , que corresponde a um dos dois únicos valores possíveis identificados acima. No entanto, o deuteron tem um momento de quadrupolo estático diferente de zero, o que *não permite excluir* a possibilidade  $L = 2$ . De fato, e como discutido com maiores detalhes adiante, o momento de quadrupolo elétrico está associado a um operador tensorial irredutível de ordem 2 agindo sobre a parte espacial do estado. Se esta tivesse uma caráter  $L = 0$  puro, o momento estático de quadrupolo elétrico seria *nulo* como uma consequência do teorema de Wigner-Eckart (elementos de matriz do operador de quadrupolo elétrico contém como fator o coeficiente de Clebsch-Gordan  $C_{0M_0}^{020} = 0$ ). O valor do momento de quadrupolo do deuteron é consistente com uma mistura relativamente modesta (da ordem de 4A sua existência revela porém que a interação responsável pelo deuteron deve *necessariamente* conter componentes *não centrais* no sentido de não invariantes por *rotações das variáveis espaciais*, embora preservando a invariância rotacional do sistema como um todo (incluindo as variáveis de spin). No caso de se

excluir dependência explícita com os momentos dos nucleons, esse caráter não central só pode consistir num efeito de correlação das variáveis de posição dos nucleons com a direção do spin total  $S = 1$ .

O potencial mais geral que é consistente com a conservação do momento angular total (invariança rotacional geral) e que não depende de momentos (dependendo portanto das posições e dos spins dos nucleons tem a forma

$$V(1, 2) = V_0(r) + \vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 V_1(r) + S_{12} V_T(r) \quad (4.1)$$

onde

$$S_{12} = 12 \frac{(\vec{s}_1 \cdot \vec{r})(\vec{s}_2 \cdot \vec{r})}{r^2} - 4\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2 \quad (4.2)$$

com  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  e  $r = |\vec{r}|$ , sendo  $\vec{s}_1$  e  $\vec{s}_2$  os spins dos dois nucleons. O termo envolvendo  $V_1(r)$  introduz uma dependência do potencial com o valor do spin total sem quebrar a invariança por rotações espaciais. De fato o operador  $\vec{s}_1 \cdot \vec{s}_2$  é diagonal na representação em que o spin total é diagonal, e seus autovalores são respectivamente  $-3/4$  e  $1/4$  para  $S = 0$  e para  $S = 1$ . O termo envolvendo  $V_T(r)$  (chamado "força tensorial"), por outro lado, correlaciona os spins com a direção de  $\vec{r}$  e quebra portanto a invariança por rotação das variáveis espaciais e com ela a conservação do momento angular *orbital*. O seu caráter escalar garante no entanto a conservação do momento angular total. O último termo na definição de  $S_{12}$  é incluído por conveniência, para que esse operador dê um resultado nulo quando agindo sobre estados de dois nucleons com  $S = 0$ .

**Alcance e profundidade do potencial.** Os dados relativos ao sistema de dois nucleons na faixa de baixas energias não são suficientes para determinar mais que alguns parâmetros ligados às funções  $V_0$ ,  $V_1$  e  $V_T$  que aparecem na Eq. 4.1. Em particular, é possível estabelecer as escalas de distância e de energia que são relevantes para essas funções. A escala de distâncias pode ser inferida do fato de que o espalhamento neutron-proton é isotrópico (no sistema de centro de massa) para energias de até  $\approx 10$  MeV. Supondo que a partir dessa energia comecem a contribuir ondas parciais com  $L \geq 1$ , e usando a relação semiclássica  $\hbar L \approx bp$ , onde  $b$  é o parâmetro de impacto e  $p$  é o módulo do momento relativo, o alcance do potencial pode ser estimado em termos do parâmetro de impacto associado a  $L = 1$  e ao valor de  $p$  correspondente à energia de 10 MeV. Isso dá uma escala típica de poucos ( $\approx 2$ ) fm. Uma consequência disso e do valor da energia de ligação do deuteron é que a profundidade do potencial que liga o deuteron deve ter como ordem de grandeza várias dezenas de MeV. Nessa escala a energia de ligação do deuteron é bastante pequena; o único estado ligado de dois nucleons é portanto bem fracamente ligado, na realidade.

Este último resultado, juntamente com o valor da secção de choque total neutron-proton extrapolada para energia zero,  $\sigma_{np}(E = 0) = 20.4 \times 10^{-24} \text{ cm}^2$ , oferece a possibilidade de estimar

de forma mais quantitativa e dependência de spin (representada pelo termo  $V_1$ ) na Eq. 4.1. De fato, em energias muito baixas o espalhamento é dominado pela onda  $s$  e a secção de choque total pode ser escrita, em geral, em termos da respectiva defasagem  $\delta_0$  como

$$\sigma = 4\pi \frac{\sin^2 \delta_0}{k^2}.$$

Como essa secção de choque é finita para  $E = 0$ , é preciso que  $\delta_0 \rightarrow 0$  linearmente com  $k$  quando  $k \rightarrow 0$ . Nessas condições, a quantidade relevante em energia zero não é o valor da defasagem, mas o do limite  $\lim \delta_0/k$  com  $k \rightarrow 0$ . Ao mesmo tempo, o valor da secção de choque em energia zero não permite distinguir entre diferentes potenciais que produzam o mesmo valor para esse limite. Esse resultado pode ser estendido para energias muito baixas (embora já não apenas zero) através da chamada expansão de alcance efetivo, que é usualmente escrita como uma expansão em potências de  $k$  da função  $k \cot \delta_0$ :

$$k \cot \delta_0 = -\frac{1}{a} + \frac{1}{2}r_0k^2 + \dots$$

O parâmetro  $a$  é chamado *comprimento de espalhamento* e coincide a menos de um sinal com o limite considerado acima que determina a secção de choque em energia zero. O parâmetro  $r_0$  no termo seguinte é chamado *alcance efetivo* da interação. Esses dois parâmetros definem completamente a secção de choque para energias suficientemente baixas. No caso do espalhamento neutron-proton há na realidade dois tipos de espalhamento: com spin total  $S = 0$  e com spin total  $S = 1$ . Com a possível dependência do spin da interação nuclear, em energia baixa haverá correspondentemente um comprimento de espalhamento e um alcance efetivo para cada um desses dois casos. Supondo que o feixe de neutrons e/ou o alvo de protons não sejam polarizados, essas duas possibilidades para o spin total aparecerão com seus respectivos pesos estatísticos que são 1 e 3 respectivamente. Dessa forma, a secção de choque em energia zero será

$$\sigma_{np}(E = 0) = 4\pi \left( \frac{1}{4}a_{S=0}^2 + \frac{3}{4}a_{S=1}^2 \right). \quad (4.3)$$

Sendo a energia de ligação do deuteron "próxima de zero", isto é, muito menor que a ordem de grandeza da profundidade do potencial, é possível obter a partir dela uma estimativa para  $a_{S=1}$ . A partir desse número, a Eq. 4.3 dá uma estimativa para o comprimento de espalhamento no estado singleto  $a_{S=0}$ .

Para obter a estimativa de  $a_{S=1}$  é preciso lembrar que a cauda exponencial  $\exp(-\kappa r)$  da função de onda relativa do deuteron para valores de  $r$  maiores que o alcance do potencial tem uma constante de decaimento  $\kappa$  relacionada com a energia de ligação  $B_d$  através de  $B_d = \hbar^2 \kappa^2 / 2\mu$  onde  $\mu$  é a massa reduzida do sistema neutron-proton. Por ser determinado no interior

do potencial que tem uma profundidade muito maior que a energia de ligação, uma estimativa razoável para a derivada logarítmica da função de onda interna no raio de alcance do potencial  $R$  e em energia zero é

$$\frac{u'(R)}{u(R)} \approx -\kappa.$$

Para o espalhamento da onda  $s$  essa quantidade deve ser identificada com a derivada logarítmica da função de onda externa no limite  $k \rightarrow 0$ , que pode ser escrita como

$$k \frac{\cos(kR + \delta_{S=1})}{\sin(kR + \delta_{S=1})} \rightarrow -\frac{1}{a_{S=1} - R} \approx -\kappa.$$

Usando  $R \approx 2$  fm o valor que se obtém para  $a_{S=1}$  é  $\approx 6.3$  fm. Esse valor corresponde a uma secção de choque  $\sigma_{S=1} \approx 4.8 \times 10^{-24}$  cm<sup>2</sup> e, através da Eq. 4.3, a um comprimento de espalhamento para o estado singleto  $a_{S=0} \approx \pm 17.8$  fm. A indeterminação do sinal de  $a_{S=0}$  é uma limitação inescapável deste procedimento, dado que a secção de choque total escrita na Eq. 4.3 só depende do quadrado dessa quantidade. A conclusão possível é portanto que o módulo do comprimento de espalhamento no estado singleto é consideravelmente *maior* que no estado tripleto.

Um resultado conhecido da teoria da expansão de alcance efetivo (v. e.g. A. Messiah, Quantum Mechanics, J. Wiley (1961), Ch. X, §20) é o de que o comprimento de espalhamento apresenta um comportamento singular quando o potencial tem um estado ligado com energia de ligação zero. Para energias de ligação pequenas mas não nulas o comprimento de espalhamento é grande e *positivo*, enquanto que para situações em que o potencial não chega a ser suficientemente ligante ele é grande e *negativo*. O sinal de  $a_{S=0}$  tem portanto uma importância crucial para determinar seja a existência de um estado ligado com  $S = 0$  do sistema neutron-proton, com energia de ligação apreciavelmente menor que a do deuteron, seja a inexistência de tal estado como estado ligado. Ele foi determinado através de experiências cuidadosas de espalhamento de neutrons frios por parahidrogênio (moléculas diatômicas de hidrogênio cujos protons tem spins anti-paralelos) em que é possível detectar a interferência do espalhamento com  $S = 1$  e com  $S = 0$ . Dessa forma foi possível determinar que  $a_{S=0}$  é *negativo*, e que portanto *não* há um estado ligado neutron-proton com  $S = 0$ . Os valores dos parâmetros da expansão de alcance efetivo obtidos de uma análise completa dos dados de espalhamento neutron-proton em baixas energias são (valores em fm)

$$\begin{aligned} a_{S=0} &= -23.71 \pm 0.07 \\ a_{S=1} &= 5.38 \pm 0.03 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
r_{0\ S=0} &= 2.4 \pm 0.3 \\
r_{0\ S=1} &= 1.71 \pm 0.03.
\end{aligned}
\tag{4.4}$$

### 4.1.2 Independência de carga e isospin

Como contrapartida das complicações relativas à dependência com o spin, a interação nuclear entre dois nucleons tem a simplicidade de ser essencialmente *independente de carga*, isto é, dependente apenas do estado espacial e de spin do par de nucleons e não da carga dos nucleons envolvidos *respeitadas as restrições impostas pelo princípio de Pauli*. Essa propriedade pode ser entendida mais facilmente através de um inventário dos estados possíveis do sistema de dois nucleons.

Tabela de estados

Como pode ser visto nessa tabela, estados *antissimétricos* no que se refere à parte espacial e de spin podem ser realizados de tres formas distintas no que se refere às cargas dos nucleons, enquanto estados *simétricos* na parte espacial e de spin podem ser realizados de uma única forma em termos das cargas. No primeiro caso, dois dos tres estados de carga possíveis (nn e pp) são simétricos na carga dos nucleons. Isso sugere que seja de certa forma natural escolher a terceira possibilidade (np) também na sua versão simétrica, (np+pn), atribuindo por outrolado a versão antissimétrica, (np-pn), aos estados simétricos na parte espacial e de spin. A independencia de carga da interação nucleon-nucleon significa que, em todos os estados espaciais e de spin que podem ser realizados de mais de uma forma em termos da carga dos nucleons, a interação nuclear *não depende* da forma como ela seja realizada. Assim a interação nuclear entre dois neutrons com  $L = S = J = 0$  é igual à interação nuclear entre um proton e um neutron ou entre dois protons (excluidos efeitos eletromagnéticos que evidentemente *não* são independentes de carga!).

O agrupamento acima dos estados de carga de dois nucleons em tripletos simétricos e singletos antissimétricos é inteiramente análogo à classificação do spin total de duas partículas de spin 1/2 em termos do spin total: o tripleto simétrico corresponde a  $S = 1$  e o singlete antissimétrico a  $S = 0$ . Essa analogia pode ser explorada mais formalmente descrevendo respectivamente o proton e o neutron como dois autoestados possíveis de uma partícula com um grau de liberdade interno (isospin) caracterizado por tres operadores  $t_i$ ,  $i = 1, 2, 3$  satisfazendo regras de comutação análogas às do momento angular e realizados em termos das matrizes de Pauli, como no caso do spin 1/2. É usual tomar esses dois estados como autovetores de  $t_3$ . A atribuição a cada um deles de um dado estado de carga (neutron ou proton) é inteiramente convencional e algo variável. Será usada aqui a convenção e associar o proton ao autovalor

+1/2 de  $t_3$ .

Observações relativas ao isospin: 1) Embora associado a um formalismo análogo ao do momento angular, o isospin é introduzido como um grau de liberdade interno dos nucleons associado à carga e portanto não tem nada a ver com as variáveis dinâmicas associadas ao momento angular e ao spin. Em particular, o espaço onde são definidas as tres componentes  $t_i$  do isospin não tem nada a ver com o espaço de configurações usual. Ele é às vezes chamado "espaço de carga". O momento angular e o spin estão associados às propriedades de transformação do estado do sistema sob rotações espaciais, e estas em nada afetam o estado de carga das partículas do sistema. 2) Um nucleon pode ser visto como um fermion com dois graus de liberdade internos (spin e isospin) cada um dos quais contendo a possibilidade de dois estados distintos. Um sistema de muitos nucleons pode ser visto como um sistema de muitos fermions desse tipo idênticos, e que portanto devem satisfazer a condição de antissimetria sob troca de *todas* as variáveis dinâmicas (i.e., inclusive as variáveis de isospin) de qualquer par. Isto significa, em particular, que um dado estado espacial pode ser ocupado no máximo por quatro nucleons, que é o número de estados distintos de spin e isospin.

### 4.1.3 Propriedades em energias maiores que 10 MeV

Acima de cerca de 10 MeV o espalhamento proton-neutron deixa de ser isotrópico no sistema de centro de massa devido à participação de ondas parciais com  $L > 0$ . Uma propriedade saliente da anisotropia observada, no entanto, é uma acentuada tendência à simetria das distribuições angulares em torno de  $90^\circ$  no sistema de centro de massa. Essa tendência se mantém até energias de centro de massa da ordem de 300 MeV. Uma simetria completa em torno de  $90^\circ$  pode ser obtida anulando todas as contribuições à amplitude de espalhamento associadas a ondas parciais com momento angular orbital  $L$  ímpar, de modo que o comportamento observado indica pelo menos uma atenuação importante dessas contribuições. O comportamento das distribuições angulares indica dessa forma uma dependência de estado adicional da interação nuclear, que consiste em que ela é consideravelmente menos intensa em canais associados a valores ímpares de  $L$ . Isso pode ser formalizado introduzindo o chamado operador de troca de Majorana  $P_M$  cuja ação sobre uma função de onda de duas partículas é definida por

$$P_M \Phi(\vec{r}_1 s_1 t_1, \vec{r}_2 s_2 t_2) \equiv \Phi(\vec{r}_2 s_1 t_1, \vec{r}_1 s_2 t_2)$$

isto é,  $P_M$  permuta as coordenadas espaciais das duas partículas. (Nessa expressão  $s_i$  e  $t_i$  são variáveis de spin e isospin das partículas, respectivamente). Uma modificação da ação do potencial sobre estados com  $L$  ímpar pode portanto ser obtida escrevendo

$$V(r) \rightarrow V(r) \frac{a + bP_M}{a + b}.$$

No caso particular em que  $a = b = 1$  a interação se anula em ondas parciais com  $L$  ímpar e o potencial dá origem a distribuições angulares rigorosamente simétricas em torno de  $90^\circ$ . Nesse caso o potencial é conhecido como “fôrça de Serber”, de modo que pode-se dizer que as distribuições angulares neutron-proton acima de 10 MeV indicam que a interação nuclear tem aproximadamente um caráter de Serber (é consideravelmente mais fraca para  $L$  ímpar).

Isotropia das distribuições angulares pp a altas energias: interferência de ondas parciais, tamanho da secção de choque exclui espalhamento apenas com  $L = 0$  por unitariedade. Chave: troca de sinal da defasagem  $L = 0$  em energias mais altas. Carôço repulsivo, raio  $\approx 0.4$  fm.

Dados de polarização em energias mais altas levam à introdução de uma interação spin-orbita de curto alcance (a dependência de spin e a fôrça tensorial não são suficientes para dar conta da polarização observada).

O resultado dessa análise leva a um potencial que pode ser escrito como uma soma de termos dependentes de spin e paridade (ou de isospin e paridade, usando a antissimetria da função de onda no formalismo de isospin). Esses potenciais tem um carôço repulsivo com raio da ordem de 0.4 fm e aqueles correspondentes a estados com  $S = 1$  incluem a fôrça tensorial.

Potenciais fenomenológicos realísticos: Hamada Johnston, Yale, Reid, Bonn, Paris. OBEP como ingrediente fonomenológico. Carôço duro vs. carôço mole.

## 4.2 Repulsão de curto alcance e saturação da matéria nuclear

A propriedade de saturação da matéria nuclear, revelada pela fórmula semi-empírica de massa e pela sistemática dos raios nucleares como função do número de massa  $A$ , é uma das mais simples que pode ser submetida ao teste de uma análise microscópica, isto é, formulada em termos de nucleons e da interação nuclear obtida fenomenologicamente a partir de dados relativos ao sistema de dois nucleons. Antes que as propriedades da interação nucleon-nucleon relacionadas com os dados de espalhamento e energias mais altas tivessem sido suficientemente entendidas, no entanto, a análise da saturação se defrontava com dificuldades importantes com respeito à origem da repulsão capaz de impedir o colapso para densidade infinita. Atualmente, o mesmo argumento pode ser usado para indicar o papel crucial desempenhado pelo carôço repulsivo para a ocorrência da saturação.

O argumento é na realidade bastante simples, e baseado no princípio variacional de Ritz, segundo o qual o valor médio de uma hamiltoniana  $H$  em um estado *arbitrário*  $|\psi\rangle$  dá um limite superior para a energia do estado fundamental  $E_0$  da mesma hamiltoniana:

$$E_0 \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle}.$$

Para um sistema extenso (infinito) de muitos corpos  $E_0$  é uma quantidade também infinita devido ao caráter extensivo da energia, e é mais conveniente por isso considerar a energia por partícula que, no formalismo de segunda quantização, pode ser escrita como

$$\frac{E_0}{A} \leq \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle}{\langle \psi | N | \psi \rangle} \quad (4.5)$$

onde  $N = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$ , com  $\alpha \equiv \{\lambda, s, t\}$  é o operador número de nucleons. O ponto crucial para o estudo da saturação é que quando o lado direito da última expressão se torna arbitrariamente negativo para algum estado  $|\psi\rangle$  com densidade arbitrariamente alta, então certamente um cálculo exato de  $E_0/A$  mostrará também esse tipo de colapso, devido à propriedade de limite superior do valor médio calculado na Eq. 4.5. Nessas condições é possível concluir rigorosamente pela não saturação do sistema independentemente da factibilidade do cálculo exato, e nisto reside precisamente o poder do método.

Uma classe particularmente simples de estados-teste, mas que é suficiente para analisar a saturação de forças representadas por potenciais suficientemente regulares (excluindo, em particular, caroços repulsivos) consiste nos estados de muitos fermions livres. Os autoestados de energia de um fermion livre pode ser tomado também como autoestados do momento multiplicados pelos espinores e iso-espinores apropriados, e problemas de normalização são minimizados adotando um volume de quantização finito  $\mathcal{V}$  e condições periódicas de contorno. Usando esses estados para definir operadores de criação e aniquilação, isto é

$$a_{\vec{k}st}^{\dagger} = \int d\vec{r} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}}{\mathcal{V}^{1/2}} \psi_{st}(\vec{r}),$$

os estados de muitos fermions livres (incluindo as propriedades exigidas de antissimetria) podem ser escritos sob a forma

$$|\vec{k}_1 s_1 t_1, \dots, \vec{k}_A s_A t_A\rangle = a_{\vec{k}_A s_A t_A}^{\dagger} \dots a_{\vec{k}_1 s_1 t_1}^{\dagger} |0\rangle \quad (4.6)$$

onde  $|0\rangle$  é o estado com zero fermions ("vácuo"). Devido às propriedades de anticomutação dos operadores de criação de férmions, todos os operadores envolvidos na Eq. 4.6 devem corresponder a estados de um férmion *diferentes*, sob pena de anulação do vetor de estado. A Hamiltoniana para o sistema de férmions livres se escreve, por outro lado, como

$$H_0 = \sum_{\vec{k}, s, t} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}st}^\dagger a_{\vec{k}st} \quad (4.7)$$

de forma que cada fermion num estado de momento  $\vec{k}$  contribui com a sua energia cinética para a energia total. Esta terá o valor mínimo para o estado 4.6 no qual sejam criados férmions nos estados disponíveis de menor momento, obedecendo as restrições do princípio de Pauli. Portanto, para o estado fundamental do sistema de férmions livres haverá um valor especial  $k_F$  do módulo de  $\vec{k}$  que será o maior valor do momento de um estado ocupado. Esse valor é chamado "momento de Fermi" do sistema, e será tanto maior quanto maior for o número  $A$  de férmions criados no volume  $\mathcal{V}$ , isto é, quanto maior for a densidade do sistema. Para relacionar quantitativamente  $k_F$  com a densidade  $A/\mathcal{V}$  basta calcular

$$A = \langle 0 | a_{\vec{k}_1 s_1 t_1}^- \dots a_{\vec{k}_A s_A t_A}^- N a_{\vec{k}_A s_A t_A}^+ \dots a_{\vec{k}_1 s_1 t_1}^+ | 0 \rangle$$

onde  $N$  tem o mesmo sentido que na Eq. 4.5. Para que o estado considerado aqui corresponde ao estado fundamental do sistema de férmions livres é preciso que os momentos  $\vec{k}_1, \dots, \vec{k}_A$  correspondam aos estados com módulo de momento entre 0 e o momento de Fermi  $k_F$ . Reescrevendo a soma que aparece em  $N$  como uma integral, de acordo com a prescrição usual

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d\vec{k},$$

resulta

$$\begin{aligned} A &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \sum_{s,t} \theta(k_F - k) \\ &= \frac{\mathcal{V}}{(2\pi)^3} \times 4 \times 4\pi \int_0^{k_F} dk k^2 = \frac{2\mathcal{V}}{3\pi^2} k_F^3. \end{aligned}$$

Aqui  $\theta(k_F - k)$  é a função degrau usual (valendo 1 para argumento positivo, zero para argumento negativo). A soma sobre os diferentes estados de spin e isospin contribuem um fator 4 na Eq. 4.8. O resultado para a densidade é portanto  $A/\mathcal{V} = (2k_F^3)/(3\pi^2)$ , ou seja, a densidade do sistema de férmions livres fixa o momento de Fermi e este é proporcional à potência 1/3 da densidade.

Um cálculo inteiramente análogo a esse permite obter o valor médio  $\langle H_0 \rangle$  da hamiltoniana de muitos corpos Eq. 4.7 no estado fundamental escrito mais uma vez sob a forma da Eq.

4.6. A única diferença co relação ao cálculo descrito na Eq. 4.8, de fato, é um fator adicional  $\hbar^2 k^2/2m$  no integrando, o que dá

$$\langle H_0 \rangle = \frac{\hbar^2 \mathcal{V}}{5m\pi^2} k_F^5 = \frac{3A}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \equiv \frac{3A}{5} E_F \quad (4.8)$$

onde foi definida a energia de Fermi  $E_F$ . Este último resultado mostra que a energia cinética média por partícula  $\langle H_0 \rangle/A$  é  $3/5$  da energia de Fermi para o estado fundamental de um gás de Fermions livres. Como esta é proporcional a  $k_F^2$ , sendo  $k_F$  proporcional a  $A/\mathcal{V}^{1/3}$ , segue que a energia (cinética!) por partícula para o gás de Fermi livre é proporcional á potência  $2/3$  da densidade. À densidade de equilíbrio da matéria nuclear ( $\simeq 1.7 \times 10^{38} \text{ cm}^{-3}$ ) as expressões acima dão

$$\begin{aligned} k_F &\simeq 1.35 \text{ fm}^{-1} \\ E_F &\simeq 36 \text{ MeV}. \end{aligned}$$

A situação de menor energia por partícula de um gás de Fermions livres corresponde portanto à densidade nula, quando o momento de Fermi (e a energia de Fermi) vai a zero. Isso se deve ao fato de que o princípio de Pauli força o sistema a manter uma energia cinética diferente de zero, a densidade finita, mesmo no estado fundamental. A pergunta que se pode fazer a seguir é como a introdução de um potencial, regular e de caráter atrativo, altera esse estado de coisas. A inclusão do potencial implica em adicionar à hamiltoniana  $H_0$  um termo de dois corpos que pode ser escrito em segunda quantização e na representação de momentos como (v. Apêndice A.2)

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \gamma\delta | v | \alpha\beta \rangle a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger a_\beta a_\alpha \quad (4.9)$$

onde os índices correspondem a uma abreviação do conjunto de números quânticos que especificam os estados de um férmion, e.g.  $\alpha \rightarrow \vec{k}_\alpha, s_\alpha, t_\alpha$ , etc. O cálculo da energia média por partícula envolve agora, além do resultado da Eq. 4.8 para a energia cinética, o termo de potencial

$$\langle V \rangle = \langle 0 | a_{\vec{k}_1 s_1 t_1} \dots a_{\vec{k}_A s_A t_A} V a_{\vec{k}_A s_A t_A}^\dagger \dots a_{\vec{k}_1 s_1 t_1}^\dagger | 0 \rangle \quad (4.10)$$

onde  $V$  é dado pela Eq. 4.9. O cálculo do último fator con as relações de anti-comutação dos operadores de criação e de aniquilação permite agora exprimir  $\langle V \rangle$  em termos de elementos de matriz do potencial de dois corpos:

$$\langle V \rangle = \sum_{\vec{k}_1 s_1 t_1, \vec{k}_2 s_2 t_2} [\langle \vec{k}_1 s_1 t_1 \vec{k}_2 s_2 t_2 | v | \vec{k}_1 s_1 t_1 \vec{k}_2 s_2 t_2 \rangle - \langle \vec{k}_1 s_1 t_1 \vec{k}_2 s_2 t_2 | v | \vec{k}_2 s_2 t_2 \vec{k}_1 s_1 t_1 \rangle]. \quad (4.11)$$

As somas nesta última relação são restritas aos estados de partícula independente ocupados, isto é, com momento menor que o momento de Fermi. O segundo elemento de matriz difere do primeiro (chamado “termo direto”) pela troca das duas partículas no estado correspondente ao “ket”, e é por isto chamado “termo de troca”. Este termo, bem como o sinal que o afeta, resultam da antissimetria do estado de muitos férmions e da simetria da interação de dois corpos.

Em princípio o cálculo dos elementos de matriz diretos e de troca que aparecem na Eq. 4.11 deve ser feito com o potencial nuclear de dois corpos completo, incluindo em particular dependência de spin e força tensorial. No que segue, por simplicidade apenas o termo central independente de spin  $V_0(|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|)$  será considerado. O cálculo dos outros termos é tecnicamente análogo (embora algo mais trabalhoso) ao do termo central independente de spin, e o resultado obtido considerando apenas este termo não é alterado pela inclusão dos demais, como pode ser verificado a título de exercício. Exprimindo as integrais sobre as posições  $\vec{r}_1$  e  $\vec{r}_2$  em termos da distância relativa  $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$  e do centro de massa  $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$  do par envolvido nos elementos de matriz, e usando o fato de que o integrando não depende da posição do centro de massa do par, é imediato obter o resultado

$$\langle V_0 \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\vec{k}_1 s_1 t_1, \vec{k}_2 s_2 t_2} \left[ \int d\vec{r} V_0(r) - \delta_{s_1 s_2} \delta_{t_1 t_2} \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} V_0(r) \right].$$

Devido aos dois deltas de Kronecker e à dependência da integral com o momento transferido  $\vec{k}_1 - \vec{k}_2$  no termo de troca, o termo direto é dominante nessa expressão. O caráter atrativo do potencial faz com que a sua integral seja *negativa*. Transformando então as somas sobre momentos em integrais, resulta que

$$\langle V_0 \rangle \simeq -|Constante| \times 16A \times k_F^3. \quad (4.12)$$

Essa dependência *atrativa* com o momento de Fermi domina para densidades altas ( $k_F \rightarrow \infty$ ) a repulsão (quadrática em  $k_F$ ) proveniente da energia cinética, de modo que o valor médio da hamiltoniana (e também o da energia por partícula) se torna arbitrariamente negativo para densidades suficientemente altas. De acordo com o princípio variacional, isso sinaliza o colapso do sistema de muitos férmions.

Uma tentativa de escapar dessa situação de colapso seria invocar o caracter aproximadamente de Serber das interações nucleares, isto é, incorporar ao cálculo o fato de que a atração representada por  $V_0$  na realidade é muito pouco efetiva nos canais com  $L$  ímpar. Para tratar esse efeito no que se refere ao potencial  $V_0$  é necessário calcular a contribuição média para a energia potencial de  $V_0 P_M$ , onde  $P_M$  é o operador de troca de Majorana. Esse cálculo é simples e dá

$$\langle V_0 P_M \rangle = \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_{\vec{k}_1 s_1 t_1, \vec{k}_2 s_2 t_2} \left[ \int d\vec{r} e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}} V_0(r) - \delta_{s_1 s_2} \delta_{t_1 t_2} \int d\vec{r} V_0(r) \right].$$

Para uma interação de dois corpos com efeitos de troca escrita como

$$v = v_0 \frac{a + b P_M}{a + b}$$

a contribuição correspondente à escrita na Eq. 4.12 é

$$\langle V_0 \frac{a + b P_M}{a + b} \rangle \simeq -|Constante| \times \left( \frac{16a}{a + b} - \frac{4b}{a + b} \right) A \times k_F^3. \quad (4.13)$$

Os efeitos de troca aparecem embutidos no fator dependente dos parâmetros  $a$  e  $a$ . É claro que para interações tipo Serber ( $a \simeq b$ ) esse fator é positivo e não modifica a conclusão anterior sobre o colapso do sistema. A estrutura desse fator mostra, de fato, que para reverter essa condição de colapso com termos de troca proporcionais a  $P_M$  é preciso ter  $b \simeq 4a$ , o que não corresponde às propriedades empíricas da interação nuclear.

Esse resultado mostra que a saturação da matéria nuclear depende de forma essencial de outros ingredientes repulsivos, além da energia cinética exigida pelo princípio de Pauli e do anulamento aproximado da atração nos canais com  $L$  ímpar, quando tratada em termos de nucleons com interações de dois corpos. Esse papel pode ser preenchido pelo caroço repulsivo que pode ser associado à interação a curtas distâncias, ao preço de algumas complicações importantes para o tratamento teórico que tem a ver com a necessidade de tratar de forma suficientemente precisa a supressão da função de onda relativa do par de nucleons interagentes a distâncias menores que o diâmetro do caroço.

## Capítulo 5

# Descrição microscópica de núcleos finitos

Os primeiros modelos microscópicos para núcleos finitos se basearam no sucesso então relativamente recente da descrição da estrutura atômica em termos de electrons independentes em um potencial médio central, e dessa forma anteciparam a idéia básica do modelo de camadas introduzido bastante mais tarde por Mayer, Jensen e Wigner. O esvaziamento das primeiras tentativas na direção de um modelo nuclear de partículas independentes deveu-se à descoberta experimental de um grande número de ressonâncias muito estreitas no espalhamento de neutrons lentos por núcleos e sobretudo ao domínio avassalador das idéias de N. Bohr e de suas supostas implicações para a natureza desse fenômeno. Essas idéias constituem a base do chamado “modelo de núcleo composto”, segundo o qual o neutron incidente interage fortemente com o núcleo de modo a rapidamente ter a sua energia dissipada para um grande número de graus de liberdade do sistema nuclear como um todo. Uma das conseqüências desse processo de equilíbrio é a rápida perda de memória acerca do seu particular processo de formação. O “estado” de núcleo composto se caracterizaria dessa forma apenas pelo valor das constantes de movimento cabíveis (energia e momento angular entre elas) e o seu decaimento posterior seria independente do seu processo de formação. Dentro do sucesso desse quadro no que concerne a descrição das ressonâncias de neutrons lentos e, como foi dito, com o apoio decisivo do poder persuasivo de Bohr, os modelos nucleares de inspiração atômica sofreram baixa considerável. Mesmo a sua reabilitação, mais de uma década mais tarde, teve que ser preparada por uma análise mais profunda das ressonâncias de neutrons lentos. Ela mostrou, visível nos dados experimentais *convenientemente reinterpretados*, a presença de efeitos atribuíveis à dinâmica de nucleons quase independentes sob a ação de um potencial médio central. Esta análise, devida a Feshbach, Porter e Weisskopf, marca também o ponto de partida da história do chamado modelo óptico para a descrição de colisões nucleares, que é até hoje uma ferramenta importante

mesmo para o tratamento de colisões envolvendo ions pesados.

O conflito entre o cenário do núcleo composto de Bohr e o modelo de partículas independentes pode ser e foi formulado em termos da questão do livre caminho médio de um nucleon no meio nuclear: enquanto modelos nucleares baseados na ideia de nucleons independentes em um potencial médio (tratado de fato como um potencial externo de um corpo) exigem para a sua validade um livre caminho médio pelo menos comparável com as dimensões nucleares, o modelo de núcleo composto sugere um livre caminho médio extremamente curto. Como o núcleo é na realidade um objeto quântico, no entanto, essa linguagem deve ser adequadamente reinterpretada por estar fortemente baseada na ideia quanticamente inadequada da trajetória de um nucleon no meio nuclear. Uma reinterpretação adequada à descrição quântica foi dada no fim da década de 50 por Gomes, Walecka e Weisskopf, numa análise hoje clássica das correlações de curto alcance produzidas pelo caráter fortemente repulsivo a curtas distâncias da interação nuclear de dois corpos. O resultado central dessa análise mostra que a modificação da função de onda relativa de um par de nucleons que interage imerso em um meio nuclear é restrita a distâncias relativas consideravelmente *menores* que a distância relativa média entre nucleons, como resultado do princípio de Pauli que exclui transições dos nucleons interagentes para estados já ocupados por outros nucleons. Desse modo, a menos de uma região relativamente pequena modificada pela interação, a função de onda relativa do par é sensivelmente igual à de um par de nucleons livres. Como consequência disso, a probabilidade de que um dado par de nucleons seja observado *fora* de seu estado relativo “livre” é pequena (da ordem de 0.15 no estado fundamental da matéria nuclear), dando fundamentação teórica ao sucesso do modelo óptico e do modelo de partícula independente. As idéias de Bohr, no entanto, permanecem válidas quando tomadas no contexto adequado das reações de ressonância, como será discutido em detalhe mais adiante no contexto das colisões nucleares.

Essa fundamentação teórica foi, na realidade, posterior à reintrodução do “modelo de camadas” por Mayer, Jensen e Wigner no início da década de 50. A base empírica essencial utilizada para essa reintrodução foi, por um lado, a sistemática dos “efeitos de camada” observados nas massas nucleares e, por outro lado, o acúmulo de informações espectroscópicas consistentes com tal tipo de descrição. Os dados mais relevantes nesse sentido foram, ao lado dos “números mágicos” de protons e neutrons, a sistemática de spins e paridades dos estados fundamentais das diferentes espécies nucleares e dos estados excitados especialmente nas vizinhanças dos números mágicos, e ainda a sistemática de outras propriedades nucleares como probabilidades de transições eletromagnéticas (especialmente a existência em determinadas regiões de massa das chamadas “ilhas de isomerismo gama”).

## 5.1 Potencial médio e interação spin-órbita

Embora claramente presentes nos desvios das massas nucleares medidas com relação aos valores preditos por fórmulas semiempíricas de massa, os números mágicos aparecem aí de forma suavizada, pois os desvios de massa dizem respeito à massa nuclear total e envolvem portanto um processo de integração das flutuações da energia de ligação dos nucleons adicionados ao sistema nuclear, conforme discutido no Capítulo 2. O procedimento mais sensível para a identificação de números mágicos, especialmente na região de núcleos mais leves, consiste portanto em examinar a sistemática das próprias energias empíricas de separação de um nucleon (proton ou neutron) nas diferentes espécies nucleares. Especificamente, um número mágico é sinalizado por uma discontinuidade no valor da energia de separação de um neutron ou de um proton com a variação de  $N$  e de  $Z$  respectivamente. Os números mágicos que emergem dessa análise (iguais para protons e neutrons) são 2, 8, 20, 28, 50, 82 e 126 (este último apenas para neutrons, devido à instabilidade Coulombiana de núcleos com muitos protons).

De forma inteiramente análoga à da estrutura de camadas atômica, esses números devem corresponder ao preenchimento completo (dentro das restrições impostas pelo princípio de Pauli) de todos os sub-estados degenerados de um nível de partícula independente ou de todos os estados e sub-estados de um grupo quase-degenerado de níveis antecedendo um hiato importante de energia até o próximo nível ou grupo de níveis. É fácil verificar (v. Fig. 5.1) que potenciais centrais de várias formas não dão conta dos números mágicos nucleares maiores que 20. O ingrediente decisivo introduzido por Mayer, Jensen e Wigner para resolver esse problema foi uma interação spin-órbita (de um corpo), análoga à interação responsável pela estrutura fina dos níveis no caso atômico, mas suficientemente forte para redistribuir os hiatos de energia no espectro de partícula independente no caso de grupos contendo níveis de momento angular mais elevado (tipicamente maior que 3).

O mecanismo pelo qual isso acontece é fácil de entender perturbativamente. A forma geral da interação spin-órbita é

$$V_{so} = v_{so}(\vec{r}) \vec{l} \cdot \vec{s}$$

onde  $\vec{r}$  é a posição do nucleon,  $\vec{l}$  é o seu momento angular orbital e  $\vec{s}$  o seu spin. O operador  $\vec{l} \cdot \vec{s}$  é diagonal na representação em que o quadrado do momento angular total  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$  é diagonal, e o valor médio de  $V_{so}$  num estado  $|nl\frac{1}{2}jm\rangle$  (que é a correção perturbativa de primeira ordem para a energia do estado) é

$$\Delta E_{l,j} = \langle nl\frac{1}{2}jm | V_{so} | nl\frac{1}{2}jm \rangle = \langle v_{so} \rangle_{nl} \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}]$$

onde  $\langle v_{so} \rangle_{nl}$  é uma integral envolvendo a função de onda radial do nível considerado de número quântico principal  $n$  e momento angular orbital  $l$ . Essa expressão é independente de  $m$  (projeção

de  $\vec{j}$  no eixo de quantização do momento angular) como conseqüência do teorema de Wigner-Eckart. De fato, como a interação é invariante sob rotações, a sua dependência em  $m$  é dada pelo coeficiente de Clebsch-Gordan  $C_{m0m}^{j0j}$  que na realidade é igual a 1 e portanto independente de  $m$ . A expressão mostra ainda que os dois valores possíveis de  $j$  para o  $l$  dado sofrem deslocamentos de energia opostos e tanto maiores quanto maior for o valor de  $l$ :

$$\begin{aligned}\Delta E_{l,l+\frac{1}{2}} &= \langle v_{so} \rangle_{nl} \frac{\hbar^2}{2} l \\ \Delta E_{l,l-\frac{1}{2}} &= -\langle v_{so} \rangle_{nl} \frac{\hbar^2}{2} (l+1).\end{aligned}$$

Para acertar os números mágicos (e também os dados espectroscópicos dos estados fundamentais, como discutido a seguir) é preciso que o estado com  $j = l + \frac{1}{2}$  seja deslocado para baixo em energia, o que indica que  $\langle v_{so} \rangle_{nl} < 0$ . Os níveis de partícula independente que resultam de um ajuste conveniente de  $v_{so}$  (e de um cálculo exato) são mostrados na última coluna da Fig. 5.1. Como se pode ver aí, o número mágico 28 é devido ao abaixamento em energia do estado  $f7/2$ , 50 resulta do abaixamento do estado  $g9/2$ , etc.

O cálculo exato de funções de onda e respectivos autovalores para os estados ligados de uma partícula sujeita à soma de um potencial central e de um potencial spin-órbita é em geral numérico e não mais difícil que o problema correspondente para um potencial central apenas. Neste caso a parte angular da função de onda não é expressa em termos de harmônicas esféricas simples, mas das autofunções do momento angular orbital acoplado ao spin

$$\mathcal{Y}_{ljm}(\hat{r}, s) = \sum_{m_l m_s} C_{m_l m_s m}^{l \frac{1}{2} j} Y_{lm_l}(\hat{r}) \chi_{\frac{1}{2} m_s}(s).$$

Escrevendo então a função de onda como

$$\phi(\vec{r}, s) = \frac{u_{nlj}(r)}{r} \mathcal{Y}_{ljm}(\hat{r}, s)$$

resulta para a função radial  $u_{nlj}(r)$  a equação

$$\frac{d^2}{dr^2} u_{nlj} - \frac{l(l+1)}{r^2} u_{nlj} + \frac{2m}{\hbar^2} \left\{ E_{nlj} - V(r) - \frac{1}{2} v_{so}(r) [j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4}] \right\} u_{nlj} = 0$$

que é uma equação de autovalores de segunda ordem do mesmo tipo que é encontrada para o caso de um potencial central puro. Aqui, no entanto, o potencial efetivo (e portanto a autofunção  $u_{nlj}(r)$  e o autovalor  $E_{nlj}$ ) dependem não apenas de  $l$  mas também do momento angular total  $j$ . No cálculo perturbativo descrito acima a dependência em  $j$  da função de onda radial é ignorada.

## 5.2 Operadores de criação e aniquilação e estados de mais de um nucleon

Com as funções de onda de partícula independente  $\phi_{nl\frac{1}{2}jm}(\vec{r}, s)$  correspondentes aos estados ligados do potencial médio apropriado (incluindo a interação spin-órbita) é possível definir os operadores de criação

$$a_{nl\frac{1}{2}jm}^\dagger = \sum_s \int d\vec{r} \phi_{nl\frac{1}{2}jm}(\vec{r}, s) \psi_s^\dagger(\vec{r}) \quad (5.1)$$

que, devido às propriedades de ortonormalidade das funções de partícula independente, satisfazem regras de anti-comutação usuais para férmions (v. Apêndice A, Eq. (A.19)). A ação de um desses operadores sobre o vácuo produz um estado cuja função de onda é a própria função de partícula independente utilizada na definição do operador conforme a Eq. 5.1:

$$\langle 0 | \psi_s(\vec{r}) a_{nl\frac{1}{2}jm}^\dagger | 0 \rangle = \phi_{nl\frac{1}{2}jm}(\vec{r}, s).$$

As propriedades de transformação desses estados sob a ação de uma rotação, dado que são autovetores de  $\vec{j}^2$  e de  $j_z$ , são portanto

$$R(\alpha\beta\gamma) a_{nl\frac{1}{2}jm}^\dagger | 0 \rangle = \sum_{m'} D_{mm'}^j(\alpha\beta\gamma) a_{nl\frac{1}{2}jm'}^\dagger | 0 \rangle$$

e como o lado esquerdo dessa expressão pode também ser escrito como  $R a_{nl\frac{1}{2}jm}^\dagger R^{-1} | 0 \rangle$ , supondo que o vácuo seja invariante por rotações (isto é,  $R(\alpha\beta\gamma) | 0 \rangle = | 0 \rangle$ ) segue que os  $(2j + 1)$  operadores  $a_{nl\frac{1}{2}jm}^\dagger$ ,  $-j \leq m \leq j$  são um tensor de Racah de ordem  $j$ .

O interesse nesses operadores vem do fato de que eles permitem escrever de forma simples e compacta estados devidamente antissimetrizados de muitos nucleons no potencial externo de um corpo. De fato, um estado de dois neutrons ou dois protons num mesmo nível  $nl\frac{1}{2}j$  pode ser escrito simplesmente (omitindo o índice indicativo da carga dos nucleons por simplicidade) como

$$|nl\frac{1}{2}jm_1 \ nl\frac{1}{2}jm_2\rangle = a_{nl\frac{1}{2}jm_1}^\dagger a_{nl\frac{1}{2}jm_2}^\dagger | 0 \rangle.$$

Nesse estado as projeções  $m_1$  e  $m_2$  do momento angular de cada um dos nucleons é bem definido. As regras de anti-comutação exigem que elas sejam diferentes sob pena de anulamento do estado. Alternativamente, é possível escrever um estado de dois nucleons em um mesmo nível no qual o momento angular total  $\vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2$  seja bem definido. As propriedades de transformação sob rotações dadas acima permitem escrever um tal estado como

$$|(nl\frac{1}{2}j)^2JM\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1m_2} C_{m_1m_2M}^{jjJ} a_{nl\frac{1}{2}jm_1}^\dagger a_{nl\frac{1}{2}jm_2}^\dagger |0\rangle \quad (5.2)$$

onde  $C_{m_1m_2M}^{jjJ}$  é um coeficiente de Clebsch-Gordan e o fator numérico inicial foi introduzido por conveniência, conforme discutido a seguir. Um cálculo direto da norma do estado definido nessa equação, utilizando a relação de simetria geral

$$C_{m_1m_2M}^{j_1j_2J} = (-1)^{j_1+j_2-J} C_{m_2m_1M}^{j_2j_1J}$$

e a relação de ortogonalidade, também geral

$$\sum_{m_1m_1} C_{m_1m_2M}^{j_1j_2J} C_{m_1m_2M}^{j_1j_2J'} = \delta_{JJ'}$$

dos coeficientes de Clebsch-Gordan, dá, com o fator numérico introduzido na Eq. 5.2,

$$\langle (nl\frac{1}{2}j)^2JM | (nl\frac{1}{2}j)^2JM \rangle = \frac{1 - (-1)^{2j-J}}{2}$$

que, dado que  $j$  é semi-inteiro e  $J$  é inteiro, vale 1 para  $J$  par e *zero* para  $J$  ímpar. Este último resultado mostra que os estados de dois nucleons idênticos num mesmo nível  $j$  com momento angular total ímpar têm norma nula. Isso é uma consequência da exigência de antissimetria, levada em conta automaticamente nesse cálculo através das relações de anti-comutação, e indica simplesmente a inexistência de tais estados. Estados com momento angular total par, por outro lado, têm norma unitária quando definidos como na Eq. 5.2. Com base nesse resultado é possível ainda definir um operador que cria, num dado nível  $j$ , *dois* nucleons acoplados a um valor  $J$  dado (que, como visto, deve ser par) do momento angular total:

$$\xi_{(nl\frac{1}{2}j)^2JM}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{m_1m_2} C_{m_1m_2M}^{jjJ} a_{nl\frac{1}{2}jm_1}^\dagger a_{nl\frac{1}{2}jm_2}^\dagger. \quad (5.3)$$

A relação entre a antissimetria exigida dos estados de dois férmions e o desaparecimento dos estados de dois nucleons num dado nível  $j$  com momento angular total ímpar pode também ser verificada de um ponto de vista “contábil”: supondo inicialmente as partículas *distinguíveis*, o número total de estados é  $(2j+1)^2$ , pois cada uma delas pode ocupar qualquer dos  $2j+1$  sub-estados  $m$  disponíveis, sem restrições. Em  $2j+1$  desses estados as duas partículas ocupam o mesmo sub-estado  $m$ , e esses estados são portanto automaticamente simétricos pela troca das duas partículas. Os estados restantes, em número de  $2j(2j+1)$ , não têm simetria definida sob troca das partículas, mas são simetrizáveis ou antissimetrizáveis no caso de partículas idênticas. O número de estados simétricos ou antissimétricos *distintos* que se pode obter deles é  $j(2j+1)$ .

Dessa forma, o número total de estados *simétricos* é  $(2j + 1) + j(2j + 1) = 3 + 7 + 11 + \dots + 2j$ , isto é, a soma do número de subestados  $M$  para os valores *ímpares* do momento angular total  $J$ ; e o número de estados *antissimétricos* é  $j(2j + 1) = 1 + 5 + 9 + \dots + (2j - 1)$ , que é a soma do número de subestados  $M$  para os valores *pares* de  $J$ .

O ensinamento que pode ser tirado desse exercício aritmético é que as restrições ligadas à estatística de Fermi (ou de Bose!) em geral diminui de forma importante o número de estados distintos possíveis do sistema em relação ao que se teria no caso de partículas distinguíveis. Um caso extremo é o de  $2j + 1$  nucleons (férmions) idênticos em um nível  $j$ . Neste caso todos os subestados  $m$  estarão necessariamente ocupados devido às restrições impostas pelo princípio de Pauli, e haverá portanto *um único* estado. Ele terá momento angular total zero, pois do contrário haveria outros sub-estados  $M$  e portanto mais que um único estado. Um outro caso cujas propriedades de momento angular podem ser inferidas facilmente é o de  $2j$  nucleons idênticos em um nível  $j$ . O número de estados deste tipo é agora  $2j + 1$ , correspondendo às diferentes possibilidades de *não* ocupação de um sub-estado  $m$ . Os valores possíveis da projeção  $z$  do momento angular total são  $-j \leq M \leq j$ , donde se pode inferir um estado de momento angular total igual a  $j$ . Isso mostra que um nível  $j$  completamente ocupado tem os mesmos números quânticos de momento angular que o vácuo; e que uma única vacância nesse nível dá estados com números quânticos de momento angular iguais aos que correspondem a ter nele uma única partícula. Esse tipo de conjugação partícula-vacância se estende também para números maiores de partículas e de vacâncias. Por exemplo, apenas valores pares do momento angular total de zero a  $2j - 1$  são obtidos quando se tem duas vacâncias em um nível  $j$ .

### 5.3 Dados espectroscópicos: acoplamento normal e emparelhamento

A discussão da seção anterior mostra que nos casos em que há mais de um nucleon (ou mais de uma vacância) em um dado nível  $j$  é possível construir diversos estados distintos utilizando diferentes acoplamentos dos momentos angulares individuais dos nucleons (ou vacâncias). Todos esses estados são dinamicamente equivalentes do ponto de vista do modelo, no sentido de que correspondem aos mesmos números de nucleons nos mesmos níveis de partícula independente, e têm portanto a mesma energia.

Essa variedade de estados possíveis segundo o modelo não corresponde, no entanto, aos dados empíricos referentes aos estados fundamentais das diferentes espécies nucleares. O que os dados mostram é que: 1) o estado fundamental de *todos* os núcleos *pares* (i.e., com  $N$  e  $Z$  pares) tem momento angular e paridade  $0^+$ ; e ainda que 2) o momento angular e paridade dos núcleos com  $A$  ímpar corresponde (em um número muito grande de casos) ao momento angular

e paridade do nível ocupado pelo nucleon ímpar segundo o esquema de níveis do modelo de partícula independente com interação spin-órbita. No entanto, é fácil ver que é possível dar conta dos números quânticos tanto de núcleos pares quanto de núcleos de massa ímpar com uma única hipótese adicional: a de que nos estados fundamentais desses núcleos os nucleons de uma dada carga estão agrupados em pares com momento angular total zero. No caso de um número ímpar de nucleons, o momento angular total e paridade corresponderá assim automaticamente aos valores do nível de partícula independente envolvido. Esta hipótese está sendo introduzida aqui sem nenhuma base dinâmica, mas apenas como uma “regra” adicional do modelo. É claro, no entanto, que isso levanta imediatamente a questão de como entender ou justificar dinamicamente a regra. Esta questão será tratada na seção seguinte, mas desde já se pode notar que ela deve estar ligada ao efeito de emparelhamento observado nas massas nucleares que leva à necessidade de se introduzir o termo  $\Delta$  na fórmula semi-empírica.

A implementação do esquema de acoplamento prescrito pela regra na linguagem de segunda quantização pode ser obtida facilmente com os ingredientes já introduzidos na seção anterior. A criação de um par de nucleons acoplados a momento angular zero num dado nível de partícula independente se faz usando o operador definido na Eq. 5.3, com  $J = M = 0$ . Para o caso de um par de neutrons

$$|N + 2, Z\rangle_{EF} \leftrightarrow \xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})^{200}}^\dagger |N, Z\rangle_{EF} \quad (5.4)$$

onde  $EF$  indica o estado fundamental,  $t_3 = -\frac{1}{2}$  é o número quântico de isospin para neutrons e  $nl\frac{1}{2}j$  se refere ao nível de menor energia não bloqueado pelo princípio de Pauli. Para o caso de um par de protons a única alteração consiste em usar na Eq. 5.4 o operador que cria um par de protons acoplados a zero, isto é  $\xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=\frac{1}{2})^{200}}^\dagger$ . Como  $N$  e  $Z$  são pares, tanto o estado de partida  $|N, Z\rangle_{EF}$  como os estados resultantes têm momento angular total  $J = 0$ . No entanto, em geral eles *não* são normalizados, como mostrado a seguir.

Partindo do estado fundamental de um núcleo duplamente mágico (isto é, com  $N$  e  $Z$  mágicos e conseqüentemente também pares), o nível  $nl\frac{1}{2}j$  na Eq. 5.4 é o primeiro nível seguinte, no espectro de partícula independente, ao último nível completamente ocupado correspondente ao número mágico considerado. Nesse caso, conforme mostrado na seção anterior e supondo que  ${}_{EF}\langle N, Z | N, Z \rangle_{EF} = 1$ , o estado  $|N + 2, Z\rangle_{EF}$  estará também devidamente normalizado. Passando agora recursivamente ao estado  $|N + 4, Z\rangle_{EF}$  ainda por meio da Eq. 5.4 resulta (supondo que o nível  $nl\frac{1}{2}j$  comporte mais de quatro neutrons)

$$|N + 4, Z\rangle_{EF} \leftrightarrow \xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})^{200}}^{\dagger 2} |N, Z\rangle_{EF}. \quad (5.5)$$

O estado proposto nesta realização do modelo como estado fundamental do núcleo com 4 neutrons fora de uma dupla camada fechada é portanto um estado com *dois pares de nucleons*

em que os momentos angulares de partícula independente são acoplados a zero. A versão desse estado escrita na Eq. 5.5 no entanto, *não é normalizada*. É fácil entender a razão para isso: o acoplamento a zero dos momentos angulares do primeiro par de nucleons utiliza na realidade *todos* os sub-estados  $m$ , devido à soma associada a esse acoplamento. De fato, o número médio de nucleons num dado sub-estado  $m$  do nível  $nl\frac{1}{2}j$  do estado 5.4 pode ser calculado como

$${}_{EF}\langle N + 2, Z | a_{nl\frac{1}{2}jmt_3=-\frac{1}{2}}^\dagger a_{nl\frac{1}{2}jmt_3=-\frac{1}{2}} | N + 2, Z \rangle_{EF} = [C_{m,-m,0}^{jj0}]^2 = \frac{2}{2j + 1}.$$

Essa ocupação parcial bloqueia também parcialmente os sub-níveis para a criação dos nucleons do segundo par na Eq. 5.5, reduzindo a norma desse estado. O estado *normalizado*  $|N + 4, Z\rangle_{EF}$  deve portanto ser escrito

$$|N + 4, Z\rangle_{EF} = \frac{\xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})^200}^\dagger{}^2 |N, Z\rangle_{EF}}{\sqrt{{}_{EF}\langle N, Z | \xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})^200}^2 \xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})^200}^\dagger{}^2 |N, Z\rangle_{EF}}}. \quad (5.6)$$

Problemas análogos (e que devem portanto receber o mesmo tratamento) acontecem no caso da criação de tres (ou mais) pares de partículas em um mesmo nível que os comporte.

O caso de núcleos de massa ímpar requer apenas a criação de um nucleon desemparelhado, além do número apropriado de pares acoplados a zero. Por exemplo, para um núcleo com três neutrons fora de uma dupla camada fechada o estado (não normalizado) previsto pelo modelo é

$$|N + 3, Z\rangle_{EF} \leftrightarrow a_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})}^\dagger \xi_{(nl\frac{1}{2}jt_3=-\frac{1}{2})^200}^\dagger |N, Z\rangle_{EF}.$$

Como no caso  $N + 4$  esse estado não é normalizado devido a efeitos de bloqueio parcial dos subníveis  $m$ . A sua normalização deve portanto ser providenciada explicitamente da mesma forma que na Eq. 5.6.

## 5.4 Interação residual de emparelhamento

A justificativa dinâmica, em termos qualitativos, do potencial de um corpo que gera o espectro de partícula independente do modelo de camadas é de que ele representa o efeito médio das interações de um nucleon com os demais nucleons do núcleo. Nesse sentido esse potencial é totalmente análogo aos que são introduzidos na física atômica para gerar a estrutura atômica de camadas, responsável pela tabela periódica dos elementos. Tanto num caso como em outro, porém, há propriedades dinâmicas cuja descrição não pode ser feita dentro dos limites de uma aproximação de partículas independentes em um potencial médio, tratado na realidade como

um potencial externo. Para descreve-las é preciso adicionar à Hamiltoniana potenciais de dois corpos para produzir as correlações necessárias, que foram descartadas no nível mais simples da descrição (nucleons independentes em um potencial médio de um corpo). Esses potenciais adicionais de dois corpos são por isso chamados potenciais (ou “fôrças”) *residuais*.

Os efeitos de emparelhamento são um exemplo de propriedades desse tipo. De fato, os operadores  $\xi_{j^2 JM}^\dagger$  introduzidos acima criam pares *correlacionados* de partículas, o que pode ser visto de várias formas. Por exemplo, o fato de que o autovalor de  $J_3$  é  $M$  em geral não determina o autovalor da componente 3 do momento angular de uma das partículas; no entanto, implica em que o autovalor correspondente da segunda partícula esteja completamente definido pelo valor que lhe seja atribuído. Com menos palavras,  $M = m_1 + m_2$  com  $M$  dado em geral não determina  $m_1$  ou  $m_2$ , mas a escolha de um valor para qualquer desses dois números determina o outro. Outra forma importante de caracterizar a presença de correlações é notar que a função de onda associada ao estado  $\xi_{j^2 JM}^\dagger$  não se escreve simplesmente como um produto (antissimetrizado) de funções de uma partícula, mas como uma combinação linear de produtos (antissimetrizados) linearmente independentes (de fato ortogonais, no caso). Cada um dos termos da combinação linear descreve um dos aspectos da vinculação recíproca dos estados das duas partículas. Tomando como exemplo o caso  $J = M = 0$ , a combinação linear inclui todas as  $2j + 1$  possibilidades  $a_{jm}^\dagger a_{j-m}^\dagger$  com pesos iguais. Cada um desses termos associa um dado valor  $m$  em uma das partículas ao valor  $-m$  na segunda. No modelo de partículas independentes puro, no entanto, todos os diferentes tipos de correlação representados pelos diferentes valores possíveis de  $J$  (e  $M$ ) são degenerados, o que mostra que não há uma preferência dinâmica por um ou outro dentre eles. O papel da interação residual é precisamente o de produzir uma hierarquização de correlações. No caso das correlações de emparelhamento isso deve consistir no favorecimento das correlações tipo  $J = 0$  em termos de energia de ligação.

Efeito perturbativo de um potencial atrativo e de curto alcance: correção de primeira ordem para a energia dos estados  $|j^2 JM\rangle$  (outros números quânticos subentendidos) para uma interação de contacto são

$$\langle j^2 JM | -g\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) | j^2 JM \rangle = -g(2j + 1) \left[ C_{\frac{1}{2} \frac{-1}{2} 0}^{jjJ} \right]^2 \times \langle I \rangle$$

onde  $\langle I \rangle$  é a integral radial envolvendo quatro funções de onda. As propriedades relevantes desse elemento de matriz são a proporcionalidade à degenerescência  $2j + 1$  do nível e a quadrado do coeficiente de Clebsch-Gordan, cujo valor favorece fortemente o estado  $J = 0$ .

Interpretação heurística em t ermos do grau de recobrimento das fun oes de onda das duas part culas.

Intera  o residual esquem tica que radicaliza a seletividade de intera  es de curto alcance

por pares de partículas acopladas a  $J = 0$ : *interação de emparelhamento*, definida em forma segundo-quantizada como

$$V_P = -g \sum_{\alpha\beta} [(2j_a + 1)(2j_b + 1)]^{\frac{1}{2}} \xi_{a^2 00}^\dagger \xi_{b^2 00} \quad (5.7)$$

onde, para abreviar a notação,  $\alpha \equiv \{a, m_a\} \equiv \{n_a l_a \frac{1}{2} j_a t_{3a}, m_a\}$ . O fator dependente da degenerescência de cada nível  $j$  na Eq. 5.7 é motivado pelo fator análogo que aparece nos elementos de matriz da interação de contacto. Essa interação de dois corpos pode ser escrita sob a forma padrão, Eq. A.25 do Apêndice A usando os elementos de matriz de dois corpos

$$\langle \alpha\beta | v_P | \gamma\delta \rangle = -g (-1)^{j_\alpha - m_\alpha + j_\gamma - m_\gamma} \delta_{\beta, -\alpha} \delta_{\delta, -\gamma} \quad (5.8)$$

visto que  $C_{m-m_0}^{jj_0} = (-1)^{j-m} / \sqrt{2j+1}$ . Portanto

$$V_P = -\frac{g}{2} \sum_{\alpha\beta} (-1)^{j_\alpha - m_\alpha + j_\beta - m_\beta} a_\alpha^\dagger a_{-\alpha}^\dagger a_{-\beta} a_\beta. \quad (5.9)$$

Nesta expressão foi usada a notação  $-\alpha$  para  $\{n_a l_a \frac{1}{2} j_a t_{3a}, -m_a\}$ .

### 5.4.1 Interação de emparelhamento e quasi-spins

A interação esquemática de emparelhamento pode ser diagonalizada exatamente no caso de  $N$  partículas idênticas (i.e.,  $N$  neutrons ou  $N$  protons) em um único nível de momento angular  $j$ . Esse caso simples pode ser relevante, por exemplo, para os isótopos de cálcio, nos quais um certo número de neutrons ocupa parcialmente o nível  $4f7/2$  (v. Fig. 5.1), ou para outros casos nos quais, como nesse, existe um nível relativamente isolado no espectro de partícula independente na região do nível de Fermi. Nessa situação particular a hamiltoniana de partícula independente é completamente degenerada, de forma que o problema do espectro se reduz ao da diagonalização de interação de emparelhamento, cuja forma se reduz a (cf. Eq. 5.7)

$$V_P = -g(2j+1) \xi_{j^2 00}^\dagger \xi_{j^2 00}$$

onde por simplicidade de notação são omitidos dos índices números quânticos não diretamente relevantes ao problema. O espectro desse operador pode ser obtido elegantemente notando que

$$[\xi_{j^2 00}, \xi_{j^2 00}^\dagger] = 1 - \frac{2\hat{N}_j}{2j+1}$$

com  $\hat{N}_j = \sum_m a_{jm}^\dagger a_{jm}$ , operador que conta o número de partículas no nível  $J$ ; e ainda

$$[\hat{N}_j, \xi_{j^2 00}^\dagger] = 2\xi_{j^2 00}^\dagger.$$

Desses dois comutadores resulta que os operadores  $\xi_{j^2 00}^\dagger$ ,  $\xi_{j^2 00}$  e  $\hat{N}_j$  satisfazem regras de comutação fechadas de forma tal que é possível com base neles formar tres operadores que satisfazem regras de comutação idênticas às do momento angular. De fato, pondo

$$\begin{aligned} Q_+ &= \sqrt{\frac{2j+1}{2}} \xi_{j^2 00}^\dagger \\ Q_- &= \sqrt{\frac{2j+1}{2}} \xi_{j^2 00} \\ Q_3 &= \frac{1}{2}(\hat{N}_j - \frac{2j+1}{2}) \end{aligned} \tag{5.10}$$

o que se encontra é

$$[Q_+, Q_-] = 2Q_3, [Q_3, Q_\pm] = \pm Q_\pm.$$

Essas variáveis dinâmicas foram batizadas como *quasi-spin* (Ref. Kerman) e permitem determinar o espectro da interação de emparelhamento em um único nível  $j$  utilizando resultados simples da teoria do momento angular quântico.

A interação de emparelhamento se escreve em termos do quasi-spin como

$$V_P = -2gQ_+Q_-.$$

Introduzindo o operador correspondente ao quadrado do quasi-spin,  $Q^2 = (Q_+Q_- + Q_-Q_+)/2 + Q_3^2$ , e usando as relações de comutação é possível escrever  $V_P$  em termos dos operadores simultaneamente diagonalizáveis  $Q^2$  e  $Q_3$  como  $V_P = -2g(Q^2 - Q_3^2 + Q_3)$ . Portanto os autovetores de  $V_P$  são os autovetores simultâneos desses dois operadores  $|qq_3\rangle$  e os autovalores correspondentes são  $-2g[q(q+1) - q_3(q_3-1)]$ .

Para entender esse resultado é preciso ainda determinar os valores possíveis dos autovalores  $q$  e  $q_3$  no caso de um valor dado de  $j$  para o nível considerado. Em geral  $q \geq |q_3|$  e para um nível  $j$  os limites para  $q_3$  são

$$-\frac{2j+1}{4} \leq q_3 \leq \frac{2j+1}{4}.$$

Portanto, o maior valor possível de  $q$  é também  $\frac{2j+1}{4}$ . O valor de  $q_3$  depende do número  $N$  de partículas presentes no nível, de modo que  $N$  determina também o *menor* valor possível de  $q$ . Em geral

$$\frac{1}{2} \left| N - \frac{2j+1}{2} \right| \leq q \leq \frac{2j+1}{4}$$

e é usual definir uma quantidade  $s$  (“seniority”) através de

$$q = \frac{1}{2} \left( \frac{2j+1}{2} - s \right) \leftrightarrow s = \frac{2j+1}{2} - 2q \quad (5.11)$$

e escrever os autovalores de  $V_P$  em termos de  $s$  e  $N$  em vez de  $q$  e  $q_3$  com o resultado

$$V_P |N, s\rangle = -\frac{g}{2} (N-s)(2j+3-N-s). \quad (5.12)$$

A definição de  $s$  na Eq. 5.11 mostra que os seus valores possíveis são  $0, 2, \dots, N$  para  $N$  par e  $1, 3, \dots, N$  para  $N$  ímpar.

**Exemplo 1.**

4 partículas ( $N=4$ );  $s = 0, 2, 4$

$$\begin{aligned} |N=4, s=0\rangle &\leftrightarrow E(N=4, s=0) = -2g[(2j+1) - 2] \\ |N=4, s=2\rangle &\leftrightarrow E(N=4, s=2) = -g[(2j+1) - 4] \\ |N=4, s=4\rangle &\leftrightarrow E(N=4, s=4) = 0 \end{aligned}$$

Realização explícita de alguns autovetores:

$$\begin{aligned} |N=4, s=0\rangle &\leftrightarrow \xi_{j^2 00}^{\dagger 2} |0\rangle \\ |N=4, s=2\rangle &\leftrightarrow \xi_{j^2 00}^{\dagger} \xi_{j^2 JM}^{\dagger} |0\rangle. \end{aligned}$$

Existem muitos estados com  $s=2$  (valores possíveis de  $J$  e  $M$ ). O valor da “seniority”  $s$  coincide com o número de partículas *não* emparelhadas a  $J=0$ . Para verificar a forma explícita de  $|N=4, s=2\rangle$  é útil a relação  $[\xi_{j^2 00}, \xi_{j^2 JM}^{\dagger}] |0\rangle = 0$ .

**Exemplo 2.**

3 partículas ( $N=3$ );  $s = 1, 3$

$$\begin{aligned} |N=3, s=1\rangle &\leftrightarrow E(N=3, s=1) = -g[(2j+1) - 2] \\ |N=3, s=3\rangle &\leftrightarrow E(N=3, s=3) = 0 \end{aligned}$$

Realização explícita do estado fundamental:

$$|N = 3, s = 1\rangle \leftrightarrow \xi_{j^2 00}^\dagger a_{jm}^\dagger |0\rangle \quad (5.13)$$

Para verificar a forma explícita de  $|N = 3, s = 1\rangle$  é útil a relação  $[\xi_{j^2 00}, a_{jm}^\dagger] |0\rangle = 0$ .

O formalismo de quasi-spins pode evidentemente ser usado também no caso em que mais que um único nível participa na dinâmica de emparelhamento. Neste caso há um quasi-spin  $\vec{Q}^{(\alpha)}$  para cada um dos níveis  $\alpha$  participantes. O acoplamento e reacoplamentos de quasi-spins se faz usando as mesmas técnicas aplicáveis ao momento angular. A hamiltoniana a ser considerada deve incluir agora explicitamente a parte de um corpo, que não é completamente degenerada como no caso de um único nível  $j$ . Escrevendo a parte de um corpo na representação dos estados de partícula independente, a hamiltoniana com interação de emparelhamento assume a forma

$$H = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} - g \sum_{\alpha\beta} \sqrt{(2j_{\alpha} + 1)(2j_{\beta} + 1)} \xi_{\alpha^2 00}^{\dagger} \xi_{\beta^2 00}, \quad (5.14)$$

usando a notação compacta definida acima para os estados de partícula independente. Quando reescrita em termos dos operadores de quasi-spin, essa hamiltoniana envolverá agora não só o quasi-spin total e sua projeção 3, mas também as projeções 3 dos quasi-spins de cada um dos níveis, através do termo de partícula independente da Eq. 5.14, que não são diagonais na representação apropriada para diagonalizar a interação de emparelhamento. Isso faz com que seja necessário recorrer a diagonalizações numéricas para obter os autovalores e autovetores de  $H$  neste caso (v. e.g. Kerman, Lawson e MacFarlane, Phys. Rev. xxx, xxxx (19xx)).

### 5.4.2 Quasi-partículas de Bogolyubov-Valatin e estados de BCS

O problema tratado na subseção anterior pode também ser analisado em termos de um tratamento desenvolvido originalmente no contexto da teoria da supercondutividade por Bardeen, Cooper e Schrieff por um lado, e por Bogolyubov e Valatin por outro. Esse tratamento é na realidade uma aproximação para a solução completa do problema, que tem no entanto a vantagem de poder ser utilizada sem qualquer modificação para interações residuais que não tenham a forma particular da interação de emparelhamento, Eq. 5.9.

**Níveis completamente ocupados como “vácuo”.** Nos termos do tratamento de segunda quantização usado até aqui, o vácuo foi definido como o autovetor simultâneo de todos os operadores número  $a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha}$  com autovalor zero (i.e., como o estado que tem zero partículas em todos os níveis de partícula independente). Como mostrado no apêndice A.2, essa definição equivale à de que o vácuo é o estado que é aniquilado por qualquer operador de aniquilação  $a_{\alpha}$ :

$$a_\alpha|0\rangle = 0$$

para qualquer  $\alpha$ . Ignorando por um momento a interação residual, isto é, tomando a hamiltoniana Eq. 5.14 com  $g = 0$ , o estado fundamental com  $A$  partículas (férmions) se obtém aplicando sobre o vácuo  $A$  operadores de criação correspondentes aos níveis de menor energia permitidos pelo princípio de Pauli:

$$|EF\rangle = \prod_{\alpha \leq \alpha_F} a_\alpha^\dagger |0\rangle.$$

Aqui  $\alpha_F$  corresponde ao nível de Fermi (último nível ocupado em  $|EF\rangle$ ). No caso em que  $A$  corresponde a uma configuração sem níveis parcialmente ocupados (isto é, os níveis estão completamente ocupados ou completamente vazios), esse estado fundamental terá necessariamente  $J = M = 0$  que são os números quânticos de momento angular do vácuo. Ele se distingue, no entanto, do vácuo pelo número de partículas, pois

$$\sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha |EF\rangle = A |EF\rangle$$

ao passo que esse mesmo cálculo dá um resultado nulo para o vácuo.

Os operadores de criação e aniquilação  $a_\alpha^\dagger$  e  $a_\alpha$  podem no entanto ser substituídos por outros operadores  $A_\alpha^\dagger$  e  $A_\alpha$  definidos pelas relações

$$\begin{aligned} \alpha > \alpha_F &\longrightarrow A_\alpha^\dagger = a_\alpha^\dagger \\ \alpha \leq \alpha_F &\longrightarrow A_\alpha^\dagger = (-1)^{j_\alpha - m_\alpha} a_{-\alpha} \end{aligned} \quad (5.15)$$

onde a notação  $-\alpha$  indica os mesmos números quânticos que  $\alpha$  mas com a projeção do momento angular igual a  $-m_\alpha$ . As propriedades relevantes dessa transformação são as seguintes:

1) Os operadores  $A_\alpha^\dagger$  e  $A_\alpha$  satisfazem relações de anticomutação idênticas às que são satisfeitas pelos  $a_\alpha^\dagger$  e  $a_\alpha$ , isto é

$$\begin{aligned} \{A_\alpha, A_\beta^\dagger\} &= \delta_{\alpha\beta} \\ \{A_\alpha, A_\beta\} &= 0. \end{aligned}$$

2) Os  $2j+1$  operadores  $A_{nl\frac{1}{2}jmt_3}^\dagger$ ,  $-j \leq m \leq j$  são um tensor de Racah de ordem  $j$ , da mesma forma que os  $a_{nl\frac{1}{2}jmt_3}^\dagger$ . Isso é óbvio da definição Eq. 5.15 para estados *acima* do nível de Fermi,

pois aí os dois tipos de operadores coincidem. *Abaixo* do nível de Fermi o operador de criação  $A_{jm}^\dagger$  é definido como  $(-1)^{j-m}a_{j-m}$  e é portanto proporcional a um operador de aniquilação. Da transformação dos  $a_{jm}^\dagger$  como tensor de Racah

$$Ra_{jm}^\dagger R^{-1} = \sum_{m'} a_{jm'}^\dagger D_{m'm}^j$$

segue que

$$Ra_{jm} R^{-1} = \sum_{m'} a_{jm'} D_{m'm}^{j*}.$$

Os operadores de aniquilação *não* têm portanto as propriedades de transformação exigidas para um tensor de Racah. No entanto, as matrizes de rotação têm a propriedade de conjugação complexa

$$D_{m'm}^{j*} = (-1)^{m'-m} D_{-m'-m}^j$$

da qual, juntamente com a relação que dá a transformação dos operadores de aniquilação, resulta que

$$R(-1)^{j-m}a_{j-m}R^{-1} = \sum_{m'} (-1)^{j-m'} a_{j-m'} D_{m'm}^j.$$

Essa relação mostra que  $(-1)^{j-m}a_{j-m}$  é de fato a componente  $m$  de um tensor de Racah de ordem  $j$ .

3) O estado  $|EF\rangle$  é o vácuo dos  $A_\alpha$ , isto é,

$$A_\alpha |EF\rangle = 0$$

para qualquer  $\alpha$ . Isto decorre imediatamente das definições, pois o operador  $A_\alpha$  corresponde a um operador de aniquilação para um estado não ocupado *ou* a um operador de criação para um estado ocupado em  $|EF\rangle$ .

A transformação Eq. 5.15 leva, portanto, dos operadores de criação e aniquilação de *partículas*  $a_\alpha^\dagger, a_\alpha$  a novos operadores de criação e aniquilação  $A_\alpha^\dagger, A_\alpha$  com propriedades algébricas idênticas mas com conteúdo físico diferente: o operador de criação  $A_\alpha^\dagger$ , por exemplo, *cria* uma partícula se  $\alpha > \alpha_F$  mas *aniquila* uma partícula se  $\alpha \leq \alpha_F$ . Para distingui-los dos  $a_\alpha^\dagger, a_\alpha$ , os  $A_\alpha^\dagger, A_\alpha$  são chamados operadores de criação e aniquilação de *quasipartículas*.

A hamiltoniana Eq. 5.14 (por enquanto com  $g = 0$ ) pode se escrita agora em termos de  $A_\alpha$  e  $A_\alpha^\dagger$  utilizando a transformação inversa da Eq. 5.15. Utilizando as relações de anticomutação

para escrever os operadores de aniquilação  $A_\alpha$  à *direita* dos operadores de criação  $A_\alpha^\dagger$  (o que se chama escrever esses operadores em *ordem normal*) o resultado que se obtém é

$$H(g=0) = \sum_{\alpha \leq \alpha_F} \epsilon_\alpha - \sum_{\alpha \leq \alpha_F} \epsilon_\alpha A_\alpha^\dagger A_\alpha + \sum_{\alpha > \alpha_F} \epsilon_\alpha A_\alpha^\dagger A_\alpha$$

de modo que a energia do estado fundamental pode ser recuperada da equação de autovalores

$$H(g=0)|EF\rangle = \sum_{\alpha \leq \alpha_F} \epsilon_\alpha |EF\rangle.$$

O uso da ordem normal para os termos de  $H$  que contém operadores de criação e aniquilação faz com que apenas o primeiro termo contribua para o autovalor.

**Transformação geral para quasi-partículas.** Uma forma de tratar a hamiltoniana da Eq. 5.14 completa, isto é, com  $g \neq 0$ , consiste em generalizar a transformação Eq. 5.15 escrevendo

$$\begin{aligned} A_\alpha^\dagger &= u_a a_\alpha^\dagger - v_a (-1)^{j_a - m_a} a_{-\alpha} \\ A_\alpha &= u_a a_\alpha - v_a (-1)^{j_a - m_a} a_{-\alpha}^\dagger \end{aligned} \quad (5.16)$$

onde  $u_a$  e  $v_a$  são coeficientes reais inicialmente arbitrários. As relações de anticomutação para esses operadores gerais de quasi-partículas são obtidas de um cálculo direto como

$$\begin{aligned} \{A_\alpha, A_\beta^\dagger\} &= (u_a^2 + v_a^2) \delta_{\alpha\beta} \\ \{A_\alpha, A_\beta\} &= 0 \end{aligned}$$

que mostram que a transformação preserva as regras de anticomutação se for satisfeita a condição

$$u_a^2 + v_a^2 = 1.$$

Essa condição pode ser satisfeita simplesmente parametrizando os coeficientes da transformação como

$$\begin{aligned} u_a &= \cos \phi_a \\ v_a &= \sin \phi_a \end{aligned} \quad (5.17)$$

onde os  $\phi_a$  são agora parâmetros livres. A transformação Eq. 5.16 com essa restrição pode ser facilmente invertida dando

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger &= u_a A_\alpha^\dagger + v_a (-1)^{j_a - m_a} A_{-\alpha} \\ a_\alpha &= u_a A_\alpha + v_a (-1)^{j_a - m_a} A_{-\alpha}^\dagger. \end{aligned} \quad (5.18)$$

A transformação 5.15 é de fato um caso particular da Eq. 5.16 com  $\phi_a = 0$  para  $\alpha > \alpha_F$  e  $\phi_a = -\pi/2$  para  $\alpha \leq \alpha_F$ .

Usando a transformação inversa 5.18 a hamiltoniana Eq.5.14 pode facilmente ser reescrita em termos dos operadores de quasi-partícula (o que no entanto envolve um esforço algébrico apreciável). O procedimento geral e os aspectos relevantes do resultado podem ser ilustrados considerando mais explicitamente o termo de um corpo. O ingrediente básico que aparece aí é o operador

$$\begin{aligned} a_\alpha^\dagger a_\alpha &= u_a^2 A_\alpha^\dagger A_\alpha + v_a^2 A_{-\alpha} A_{-\alpha}^\dagger + u_a v_a (-1)^{j_a - m_a} (A_\alpha^\dagger A_{-\alpha}^\dagger + A_{-\alpha} A_\alpha) \\ &= v_a^2 + u_a^2 A_\alpha^\dagger A_\alpha - v_a^2 A_{-\alpha}^\dagger A_{-\alpha} + u_a v_a (-1)^{j_a - m_a} (A_\alpha^\dagger A_{-\alpha}^\dagger + A_{-\alpha} A_\alpha) \end{aligned} \quad (5.19)$$

que aparece nesta última linha com os operadores de quasi-partícula escritos em ordem normal. Isso leva em particular ao aparecimento de um termo  $v_a^2$  que deve ser entendido como um múltiplo do operador unidade. Os dois termos seguintes envolvem operadores número de quasi-partículas e os dois últimos respectivamente criam e aniquilam um par de quasi-partículas. Termos deste tipo foram chamados “termos perigosos” por Bogolyubov, e deles mais se dirá adiante.

O resultado 5.19 dá imediatamente a forma do termo de um corpo de  $H$ . Além disso, permite escrever o operador número de *partículas* em termos de *quasi-partículas*:

$$\begin{aligned} \hat{N} &= \sum_\alpha a_\alpha^\dagger a_\alpha = \\ &= \sum_\alpha v_a^2 + \sum_\alpha (u_a^2 - v_a^2) A_\alpha^\dagger A_\alpha + \sum_\alpha u_a v_a (-1)^{j_a - m_a} (A_\alpha^\dagger A_{-\alpha}^\dagger + A_{-\alpha} A_\alpha). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Essa expressão mostra que, devido aos “termos perigosos” na expressão de  $\hat{N}$ , esse operador em geral *não comuta* com o número de quasi-partículas

$$\hat{\mathcal{N}} = \sum_\alpha A_\alpha^\dagger A_\alpha.$$

Isso significa que estados com um número bem definido de partículas (que são autoestados de  $\hat{N}$ ) em geral não são autoestados de  $\hat{\mathcal{N}}$ , isto é, em geral não têm um número bem definido de quasi-partículas *e vice-versa*.

A transcrição da parte de dois corpos de  $H$  envolve escrever em termos de quasi-partículas produtos de quatro operadores de partícula, do que resultam (antes de qualquer reordenamento) 16 termos diferentes. Cada um desses termos contém quatro operadores de quasi-partícula, dos quais de zero a quatro são operadores de criação. Esses operadores aparecem nos diferentes termos com ordenamentos não normais em muitos casos (por exemplo  $A_{-\alpha}A_{-\alpha}^\dagger A_\beta A_\beta^\dagger$ ). Usando as relações de anticomutação é possível reordenar cada termo para que apareça em ordem normal, do que resultam ainda termos adicionais, resultantes das funções delta dos anticomutadores, com respectivamente dois ou zero operadores de quasi-partícula. No caso do exemplo acima essa redução segue os seguintes passos:

$$\begin{aligned} A_{-\alpha}A_{-\alpha}^\dagger A_\beta A_\beta^\dagger &= A_\beta A_\beta^\dagger - A_{-\alpha}^\dagger A_{-\alpha} A_\beta A_\beta^\dagger \\ &= 1 - A_\beta^\dagger A_\beta - A_{-\alpha}^\dagger A_{-\alpha} + A_{-\alpha}^\dagger A_{-\alpha} A_\beta^\dagger A_\beta \\ &= 1 - A_\beta^\dagger A_\beta - A_{-\alpha}^\dagger A_{-\alpha} + A_{-\alpha}^\dagger A_\beta \delta_{-\alpha\beta} - A_{-\alpha}^\dagger A_\beta^\dagger A_{-\alpha} A_\beta. \end{aligned}$$

Nesta última linha todos os termos estão escritos em ordem normal e, como anunciado, surgiram termos com dois e zero operadores de quasi-partícula do processo de reordenamento. Submetendo cada um dos 16 termos a um processo análogo e utilizando a relação 5.19 para a parte de um corpo resulta para  $H$  uma expressão da forma

$$H = H_0 + H_{11} + H_{20} + H_{02} + H_{40} + H_{04} + H_{31} + H_{13} + H_{22} \quad (5.21)$$

onde  $H_0$  contém todos os termos com zero operadores de quasi-partícula e cada um dos  $H_{mn}$  contém todos os termos com  $m$  operadores de criação  $A^\dagger$  e  $n$  operadores de aniquilação  $A$  em ordem normal. Vale notar explicitamente que os termos da 5.21 com menos de quatro operadores contém contribuições tanto da parte de um corpo de  $H$  como da interação de emparelhamento.

**Aproximação variacional.** Um método padrão para aproximar o estado fundamental de  $H$  (aplicável também para interações residuais mais gerais que a interação de emparelhamento pura) consiste em escreve-lo como um vácuo de *quasi-partículas*, definido pela relação

$$\hat{\mathcal{N}}|\tilde{0}\rangle = 0 \quad (5.22)$$

ou, equivalentemente, por  $A_\alpha|\tilde{0}\rangle = 0$  para todo  $\alpha$ . A definição precisa desse estado depende, é claro, da definição precisa das quasipartículas, isto é, da escolha dos ângulos  $\phi_\alpha$ , Eq. 5.17. Isso é feito através do critério variacional usual, que consiste em minimizar o valor médio da

hamiltoniana no estado teste. O problema que surge aqui é que, por conter um número definido (zero) de *quasi-partículas*, o estado da Eq. 5.22 em geral não conterá um número definido de *partículas*, isto é, não corresponderá a um sistema nuclear com um número definido de nucleons. O número *médio* de partículas no vácuo de quasi-partículas é

$$\langle \tilde{0} | \hat{N} | \tilde{0} \rangle = \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2$$

como pode ser imediatamente verificado usando a Eq. 5.20. Para contornar a dificuldade da indefinição do valor do número de partículas o que se faz é fixar pelo menos o valor médio de  $\hat{N}$  o que, segundo a última relação, impõe restrições sobre os valores dos  $\phi_{\alpha}$ . Isso pode ser tratado convenientemente com a técnica dos multiplicadores de Lagrange, o que leva finalmente ao problema variacional

$$\delta \langle \tilde{0} | H - \mu \hat{N} | \tilde{0} \rangle = 0 \quad (5.23)$$

onde a variação é feita sobre os  $\phi_{\alpha}$  e  $\mu$  é o multiplicador de Lagrange que é determinado pela condição subsidiária sobre o número de partículas:

$$\langle \tilde{0} | \hat{N} | \tilde{0} \rangle = \bar{N}. \quad (5.24)$$

O multiplicador de Lagrange  $\mu$  pode ser interpretado como o potencial químico do sistema (no caso, a “temperatura zero”), que mede a variação da energia devida à variação do número de partículas que ele contém.

Usando as expressões de  $H$  e  $\hat{N}$  em termos dos operadores de quasi-partícula escritas em forma normal, Eqs. 5.21 e 5.20, a equação variacional 5.23 se reduz simplesmente a

$$\delta(H_0 - \mu \sum_{\alpha} v_{\alpha}^2) = 0$$

com a condição subsidiária

$$\sum_{\alpha} v_{\alpha}^2 = \bar{N}.$$

Um cálculo algébrico longo mas direto dá, por outro lado,

$$H_0 = \sum_{\alpha} \epsilon_{\alpha} v_{\alpha}^2 - g \sum_{\alpha} \left( v_{\alpha}^4 + \frac{1}{2} u_{\alpha} v_{\alpha} \sum_{\beta} u_{\beta} v_{\beta} \right)$$

de modo que a forma explícita da Eq. 5.23 é

$$\delta \left[ \sum_{\alpha} (\epsilon_a - \mu) v_a^2 - g \sum_{\alpha} \left( v_a^4 + \frac{1}{2} u_a v_a \sum_{\beta} u_b v_b \right) \right] =$$

$$\delta \left[ \sum_{\alpha} (\epsilon_a - \mu) \sin^2 \phi_a - g \sum_{\alpha} \left( \sin^4 \phi_a + \frac{1}{8} \sin 2\phi_a \sum_{\beta} \sin 2\phi_b \right) \right] = 0.$$

A condição sobre os ângulos  $\phi_a$  que resulta daí pode ser escrita sob a forma

$$\tan 2\phi_a = \frac{\frac{g}{2} \sum_{\beta} \sin 2\phi_b}{\epsilon_a - \mu - 2g \sin^2 \phi_a} = \frac{\Delta}{\tilde{\epsilon}_a - \mu} \quad (5.25)$$

onde foram introduzidas as definições

$$\Delta \equiv \frac{g}{2} \sum_{\beta} \sin 2\phi_b$$

e

$$\tilde{\epsilon}_a = \epsilon_a - \Delta E_a \equiv \epsilon_a - 2g \sin^2 \phi_a.$$

Neste caso da interação pura de emparelhamento, a quantidade  $\Delta$  é independente do nível considerado  $a$ . As energias  $\tilde{\epsilon}_a$  podem ser vistas como novas energias de partícula independente que diferem das originais pelos deslocamentos  $\Delta E_a$ , devidos à interação residual.

Da Eq. 5.25 é fácil obter o seno e o cosseno de  $2\phi_a$  como

$$\sin 2\phi_a = \frac{\Delta}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2}}; \quad \cos 2\phi_a = \frac{\tilde{\epsilon}_a - \mu}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2}}.$$

Substituindo a expressão para  $\sin 2\phi_a$  na definição de  $\Delta$  resulta a “equação do Gap”

$$\Delta = \sum_{\alpha} \frac{\Delta}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2}}. \quad (5.26)$$

Por outro lado, como

$$v_a^2 = \sin^2 \phi_a = \frac{1}{2} (1 - \cos 2\phi_a) = \frac{1}{2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon}_a - \mu}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2}} \right]$$

a condição subsidiária que fixa o número médio de partículas pode ser escrita sob a forma

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon}_a - \mu}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2}} \right] = \bar{N}. \quad (5.27)$$

O critério variacional para a energia do estado fundamental leva portanto às equações 5.26 e 5.27 que devem ser resolvidas para  $\Delta$  e  $\mu$ , dadas as energias de partícula independente  $\tilde{\epsilon}_a$ . A equação do Gap admite sempre a solução trivial  $\Delta = 0$  que corresponde a

$$\sin 2\phi_a = 2 \sin \phi_a \cos \phi_a = 0.$$

Essa condição (bem como a que se refere ao número de partículas) é satisfeita pelo estado  $|EF\rangle$  que é o vácuo das quasi-partículas introduzidas acima no caso  $g = 0$  (“solução normal”). Quando  $g \neq 0$  pode haver, além dessa, uma outra solução não trivial em que  $\Delta \neq 0$ , que corresponde a uma energia *menor* que a da solução normal e que portanto deve ser vista como a melhor aproximação para o estado fundamental. A energia correspondente pode ser calculada como

$$E_0 = \langle \tilde{0} | H | \tilde{0} \rangle = H_0$$

com este último objeto calculado com os valores de  $\Delta$  e  $\mu$  obtidos resolvendo as equações variacionais.

**Propriedades das soluções com  $\Delta \neq 0$ .** A relação 5.27 que dá o número total (médio)  $\bar{N}$  de partículas se escreve como uma soma de contribuições  $\bar{N}_a$  ligadas a cada um dos níveis  $a$  incluído no cálculo. Levando em conta a degenerescência dos  $2j_a + 1$  subníveis  $m_a$ , resulta que o número de partículas no nível  $a$  é

$$\bar{N}_a = (2j_a + 1)v_a^2 = \frac{2j_a + 1}{2} \left[ 1 - \frac{\tilde{\epsilon}_a - \mu}{\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (5.28)$$

ou seja,  $v_a^2$  representa a fração da capacidade do nível  $a$  que está em média ocupada na aproximação variacional obtida para o estado fundamental.

O papel desempenhado pelo potencial químico  $\mu$  e por  $\Delta$  nessa solução pode ser elucidado notando que  $v_a^2$  se aproxima de um quando  $(\tilde{\epsilon}_a - \mu) \gg \Delta$  e se aproxima de zero quando  $(\tilde{\epsilon}_a - \mu) < 0$  e  $|\tilde{\epsilon}_a - \mu| \gg \Delta$ . Isso mostra que  $\mu$  tem o papel de uma “energia de Fermi média” quando a fração ocupada dos níveis varia suavemente com a energia deles de zero a um desde valores muito menores até valores muito maiores que  $\mu$ . O parâmetro  $\Delta$ , por outro lado, controla a largura do intervalo de energia em que ocorre a transição. Em particular, para o caso especial da solução normal com  $\Delta = 0$ , não há efeitos de emparelhamento no estado fundamental e a passagem

de níveis ocupados para níveis não ocupados é abrupta, sendo que nesse caso  $\mu$  coincide com a energia de Fermi  $\epsilon_F$ . Em termos qualitativos, as ocupações parciais na zona de transição entre a região de ocupações muito próximas de um e de zero respectivamente são uma manifestação da existência de correlações entre as partículas, como efeito da interação residual. O modo pelo qual correlações produzem ocupações parciais foi já tratado na seção 5.3 no contexto do acoplamento dos momentos angulares de um par de partículas. No tratamento em termos de quasi-partículas, esses efeitos de correlação são efetivamente embutidos na definição das quasi-partículas, de forma que o vácuo destas (em que não há *quasi-partículas* e portanto tão pouco correlações entre *quasi-partículas*) descreva (aproximadamente) um estado *correlacionado* de muitas *partículas*. Como será discutido na seção seguinte, o fato, em princípio desconcertante, de que o vácuo de quasi-partículas não corresponde em geral a um número bem definido de partículas, é de fato o mecanismo essencial que possibilita a redução (aproximada) do estado correlacionado de muitas partículas a tal estado simples.

A resolução das equações 5.26 e 5.27 para obter  $\Delta$  e  $\mu$  deve ser feita em geral numericamente. No entanto, a solução é simples e pode ser obtida analiticamente no caso especial de um único nível  $a$ . Nesse caso as somas nessas equações introduzem na realidade apenas fatores  $2j_a + 1$  correspondentes aos diferentes valores da componente 3 do momento angular do nível. A equação do Gap dá, portanto,

$$\sqrt{(\tilde{\epsilon}_a - \mu)^2 + \Delta^2} = \frac{g}{2}(2j_a + 1)$$

que permite eliminar  $\Delta$  da condição subsidiária, Eq. 5.27, que fica reduzida a

$$\bar{N} = \frac{2j_a + 1}{2} \left[ 1 - 2 \frac{\tilde{\epsilon}_a - \mu}{(2j_a + 1)g} \right].$$

O valor de  $\mu$  é portanto

$$\mu = \tilde{\epsilon}_a + g \left[ \bar{N} - \frac{2j_a + 1}{2} \right]. \quad (5.29)$$

Substituído na equação do Gap, ele dá para  $\Delta$

$$\Delta = g \sqrt{\bar{N} [2j_a + 1 - \bar{N}]}. \quad (5.30)$$

Este resultado mostra que  $\Delta$  se anula nos casos extremos  $\bar{N} = 0$  (nível completamente vazio) e  $\bar{N} = 2j_a + 1$  (nível completamente ocupado), passando por um máximo para  $\bar{N} \sim (2j_a + 1)/2$ . O potencial químico (Eq. 5.29), por outro lado, está abaixo da energia  $\tilde{\epsilon}_a$  do nível para  $\bar{N} = 0$  e acima para  $\bar{N} = 2j_a + 1$ , cruzando essa energia quando a ocupação média é 0.5.

A forma explícita, em termos de partículas, do vácuo de quasi-partículas para uma solução da equação de Gap com  $\Delta \neq 0$  é simples e bem conhecida: ela corresponde ao chamado estado de

BCS (Bardeen, Cooper, Schriffer) utilizado pela primeira vez na descrição do emparelhamento de electrons no contexto da teoria da supercondutividade. Com a notação utilizada acima ele pode ser escrito como

$$|\tilde{0}\rangle = \prod_{\alpha>0} [u_\alpha + v_\alpha(-1)^{j_\alpha - m_\alpha} a_\alpha^\dagger a_{-\alpha}|0\rangle \quad (5.31)$$

onde os  $a^\dagger$ ,  $a$  são operadores de *partícula*, a notação  $\alpha > 0$  se refere a estados  $\{a, m_a\}$  com  $m_a > 0$  e  $-\alpha$  indica o estado  $\{a, -m_a\}$ . Usando a definição 5.16 do operador de aniquilação de quasi-partícula  $A_\alpha$  e as regras de anticomutação é imediato verificar, usando a 5.31, que  $A_\alpha|\tilde{0}\rangle = 0$  para todo  $\alpha$ . Essa forma explícita para  $|\tilde{0}\rangle$  mostra que esse estado contém em geral componentes com *todos os números pares possíveis de partículas*, desde zero (vácuo) até o número total de estados de uma partícula contidos no grupo de níveis incluídos no cálculo. Por isso, esse estado deve ser visto como apropriado para a descrição de núcleos *pares*. Mesmo no caso em que a condição subsidiária que fixa o número médio de partículas é tratada com  $\bar{N}$  ímpar, o estado resultante  $|\tilde{0}\rangle$  consistia numa combinação linear de componentes com diferentes números *pares* de partículas. Estados apropriados para a descrição de núcleos de massa ímpar podem ser obtidos *criando* uma quasi-partícula sobre o estado de BCS, como discutido abaixo.

Variança  $\langle\tilde{0}|\hat{N}^2|\tilde{0}\rangle - \bar{N}^2$  como indicador do grau de dispersão dos valores de  $\hat{n}$  contidos no vácuo de quasi-partículas.

**Núcleos com  $A$  ímpar.** Criação de uma quasi-partícula sobre o vácuo de quasi-partículas: bloqueio.

$$A_\alpha^\dagger|\tilde{0}\rangle = \prod_{0<\beta\neq|\alpha|} [u_\beta + v_\beta(-1)^{j_\beta - m_\beta} a_\beta^\dagger a_{-\beta}^\dagger a_\alpha^\dagger|0\rangle.$$

Energia: termo  $H_{11}$ , níveis de quasi-partícula:

$$H_{11} = \sum_{\alpha} \sqrt{(\tilde{\epsilon}_\alpha - \mu)^2 + \Delta^2} A_\alpha^\dagger A_\alpha.$$

Energia de excitação mínima da ordem de  $2\Delta$ .

### 5.4.3 Tratamento de correlações e quebra de simetrias

Dois casos a tratar: 1) finitude do núcleo como resultado de correlações; modelo de partícula independente e quebra de simetria translacional (conservação do momento de centro de massa). 2) descrição das correlações de emparelhamento e quebra da conservação do número de partículas.

Exemplo ilustrativo relativo a 1): Função de onda exata para um deuteron gaussiano em voo, autofunção exata da hamiltoniana

$$H = \frac{\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2,$$

centro de massa  $\vec{R} = (\vec{r}_1 + \vec{r}_2)/2$  com momento  $\hbar\vec{K}$ :

$$\Psi_{\vec{K}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N \phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \exp \left[ i\vec{K} \cdot \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} \right]$$

com

$$\phi(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \exp -\frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{2b^2}, \quad b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}.$$

O coeficiente  $N$  é um fator de normalização. O estado correspondente a essa função de onda não é localizado, mas as duas partículas estão correlacionadas no sentido de que sua *distancia relativa* é limitada pela gaussiana. A “finitude” desse deuteron está contida na propriedade de correlação de que a densidade de probabilidade associada a  $\Psi_{\vec{K}}$  se reduz da forma descrita pelo fator gaussiano quando a distância relativa entre as duas partículas aumenta. Uma descrição de “partículas independentes” que é capaz de reproduzir essa correlação pode ser obtida construindo um pacote de ondas também gaussiano na coordenada do centro de massa  $\vec{R}$ :

$$\int d\vec{K} e^{i\vec{K} \cdot \vec{R}} e^{-\beta^2 K^2} = n e^{-\frac{R^2}{4\beta^2}}. \quad (5.32)$$

Isso corresponde a localizar o centro de massa e portanto destruir a propriedade que  $\Psi_{\vec{K}}$  tem de ser uma autofunção da Hamiltoniana (livre) do centro de massa do par de partículas. O pacote gaussiano 5.32 calculado com as funções de onda de dois corpos correlacionada tem a forma

$$\int d\vec{K} e^{-\beta^2 K^2} \Psi_{\vec{K}}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = N' \exp \left[ -\frac{(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)^2}{16\beta^2} - \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{2b^2} \right]$$

que, com a escolha  $8\beta^2 = b^2$  se reduz a uma função de onda produto, na qual portanto as duas partículas não estão mais correlacionadas:

$$N' \exp \left[ -\frac{(\vec{r}_1 + \vec{r}_2)^2}{2b^2} - \frac{(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)^2}{2b^2} \right] = N' \exp \left[ -\frac{r_1^2}{b^2} - \frac{r_2^2}{b^2} \right].$$

O estado correspondente a essa função de onda viola a simetria translacional do problema de duas partículas mas, às custas dessa violação, permite descrever corretamente o estado relativo em termos de gaussianas de partícula independente no potencial harmônico  $V(\vec{r}_i) = m\omega_0^2 \vec{r}_i^2$ .

# Capítulo 6

## Propriedades eletromagnéticas

Há duas classes de propriedades a considerar: 1. Propriedades de interação com campos elétricos e magnéticos externos, estáticos, e 2. Interação com o campo de radiação (emissão, absorção e espalhamento de ftons). Nos dois casos o tratamento será perturbativo, no sentido que momentos multipolares estáticos e probabilidades de transição envolvendo emissão ou absorção de ftons serão calculados em termos de modelos nucleares nos quais as interações externas são ignoradas. Isso se justifica, no caso de campos externos estáticos, para valores não absurdamente grandes desses campos (que em todo caso são ajustáveis nas situações experimentais relevantes). No caso de processos envolvendo radiação, a justificativa depende da utilidade da expansão perturbativa na constante de acoplamento que envolve como “número pequeno” a constante de estrutura fina  $\alpha = 1/137$ .

### 6.1 Interação com campos externos estáticos

Um campo elétrico externo pode ser representado por um potencial escalar  $\Phi(\vec{r})$  que satisfaz à equação de Laplace e que portanto pode ser representado na região de interesse por uma expansão em “harmônicas sólidas” (que são as soluções regulares dessa equação cuja parte angular é dada em termos de harmônicas esféricas):

$$\Phi(\vec{r}) = \sum_{lm} a_{lm} r^l Y_{lm}(\hat{r})$$

onde  $\hat{r}$  indica os ângulos do vetor  $\vec{r}$ . A energia de interação clássica com uma distribuição de cargas descrita por uma densidade  $\rho(\vec{r})$  é então dada por

$$H^e = \int d\vec{r} \Phi(\vec{r}) \rho(\vec{r}) = \int d\vec{r} \sum_{lm} a_{lm} r^l Y_{lm}(\hat{r}) \rho(\vec{r}) \equiv \sum_{lm} a_{lm} \mathcal{M}_{lm}^e \quad (6.1)$$

onde foram definidos os momentos multipolares elétricos

$$\mathcal{M}_{lm}^e \equiv \int d\vec{r} r^l Y_{lm}(\hat{r}) \rho(\vec{r}). \quad (6.2)$$

Quando a distribuição de cargas é associada a um sistema quântico como um núcleo a densidade de carga  $\rho(\vec{r})$  deve ser substituída pela variável dinâmica apropriada (operador) do sistema. No caso nuclear, o modelo mais simples consiste em considerar o núcleo como uma coleção de nucleons puntiformes com carga  $(1/2 + t_3^{(i)})$  aos quais estão associadas variáveis de posição  $\vec{r}_i$ . Nesse caso a densidade de carga associada à posição  $\vec{r}$  é dada pelo operador

$$\rho(\vec{r}) \rightarrow \hat{\rho}(\vec{r}) = e \sum_i \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right) \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$$

o que transforma os momentos multipolares em operadores de um corpo dados por

$$\mathcal{M}_{lm}^e \rightarrow \hat{\mathcal{M}}_{lm}^e = e \sum_i r_i^l Y_{lm}(\hat{r}_i) \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right).$$

Esos operadores podem ser expressos na linguagem de segunda quantização como

$$\hat{\mathcal{M}}_{lm}^e = \sum_{\alpha\beta} \langle \alpha | e \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right) r^l Y_{lm}(\hat{r}) | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta$$

onde os elementos de matriz de um corpo são calculados em termos de uma base conveniente de estados de um nucleon, utilizada também para definir os operadores de criação e de aniquilação.

Uma propriedade importante dos momentos multipolares  $\hat{\mathcal{M}}_{lm}^e$  é o fato de eles serem tensores de Racah de ordem  $l$ . Chamando  $|Psi_{JM}\rangle$  os vetores de estado de um dado nível nuclear de momento angular  $J$ , essa propriedade permite o uso do teorema de Wigner-Eckart para escrever

$$\langle \Psi_{JM+m} | \hat{\mathcal{M}}_{lm}^e | Psi_{JM} \rangle = \frac{(-1)^{2l}}{\sqrt{2J+1}} C_{MmM+m}^{JJJ} \langle \Psi_J | | \hat{\mathcal{M}}_l^e | | \Psi_J \rangle \quad (6.3)$$

onde o elemento de matriz reduzido que aparece como último fator é comum a todos os elementos de matriz, que dessa forma diferem apenas por fatores geométricos (coeficientes de Clebsch-Gordan). Por isso é possível associar a cada nível nuclear um único número, chamado o momento multipolar de ordem  $l$  do nível, convencionalmente escolhido entre as diferentes possibilidades oferecidas pela Eq. 6.3. A escolha usualmente feita consiste em definir o momento multipolar de ordem  $l$  como o elemento de matriz

$$\langle \hat{\mathcal{M}}_l^e \rangle = \langle \Psi_{JM=J} | \hat{\mathcal{M}}_{l0}^e | Psi_{JM=J} \rangle. \quad (6.4)$$

Em alguns casos inclui-se ainda um fator  $\sqrt{4\pi/(2l+1)}$  ligado a uma definição alternativa do operador  $\hat{\mathcal{M}}_{lm}^e$  em que  $Y_{10}(\theta)$  é substituído por um polinômio de Legendre  $P_l(\theta)$ , e eventualmente ainda outros fatores numéricos convencionais. Em particular, o momento de quadrupolo elétrico  $Q$  é definido em termos da quantidade expressa na Eq. 6.4 como

$$Q = 2\sqrt{\frac{4\pi}{5}} \langle \hat{\mathcal{M}}_l^e \rangle.$$

Isso implica em usar a função angular  $3\cos^2\theta - 1 = 2P_2(\theta)$  em vez de  $Y_{20}(\theta)$  na definição do operador  $\hat{\mathcal{M}}_{lm}^e$ .

A interação perturbativa de um sistema nuclear com um campo magnético externo pode ser tratada de forma semelhante. Nesse caso a energia de interação clássica tem a forma

$$H^m = - \int d\vec{r} \vec{\mu}(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}) \quad (6.5)$$

onde  $\vec{\mu}(\vec{r})$  é a densidade de magnetização, relacionada com a densidade de corrente por

$$\vec{j}(\vec{r}) = c\vec{\nabla} \times \vec{\mu}(\vec{r}) \quad (6.6)$$

e  $\vec{B}(\vec{r})$  é o campo magnético externo. Na região espacial de interesse esse campo satisfaz  $\vec{\nabla} \times \vec{B} = 0$  além da equação de Maxwell  $\vec{\nabla} \cdot \vec{B} = 0$  e portanto pode ser escrito em termos de um potencial magnetostático escalar  $\Xi(\vec{r})$  que satisfaz a equação de Laplace:

$$\vec{B}(\vec{r}) = -\vec{\nabla}\Xi(\vec{r}); \quad \nabla^2\Xi(\vec{r}) = 0.$$

Dessa forma o potencial magnetostático pode ser expandido em harmônicas sólidas

$$\Xi(\vec{r}) = \sum_{lm} b_{lm} r^l Y_{lm}(\hat{r})$$

e a energia de interação pode ser escrita como uma soma de contribuições multipolares

$$H^m = \sum_{lm} b_{lm} \mathcal{M}_{lm}^m$$

com

$$\mathcal{M}_{lm}^m = \int d\vec{r} \vec{\mu}(\vec{r}) \cdot \vec{\nabla}[r^l Y_{lm}(\hat{r})]. \quad (6.7)$$

Esta última expressão pode ainda ser transformada de forma a exprimir os momentos magnéticos em termos da densidade de corrente  $\vec{j}(\vec{r})$  em vez da densidade de magnetização

$\vec{\mu}(\vec{r})$ . Fazendo uma integração por partes da Eq. 6.7 e usando uma identidade envolvendo nablas é possível reescrever essa equação como

$$\mathcal{M}_{lm}^m = - \int d\vec{r} [\vec{\nabla} \cdot \vec{\mu}(\vec{r})] r^l Y_{lm}(\hat{r}) = - \frac{1}{l+1} \int d\vec{r} \vec{\nabla} \cdot [\vec{r} \times (\vec{\nabla} \times \vec{\mu}(\vec{r}))].$$

O anulamento do termo integrado na integração por partes resulta de que é sempre possível definir a densidade de magnetização de formas que ela se anule onde a densidade de corrente se anula. De fato, a Eq. 6.6 mostra que aí  $\vec{\mu}(\vec{r})$  é irrotacional e portanto pode ser anulada subtraindo o gradiente de uma função de  $\vec{r}$  sem que isso afete a distribuição de correntes onde ela não é nula. Usando a Eq. 6.6 e com uma nova integração por partes o que se obtém é

$$\mathcal{M}_{lm}^m = \frac{1}{c} \frac{1}{l+1} \int d\vec{r} [\vec{r} \times \vec{j}(\vec{r})] \cdot \vec{\nabla} (r^l Y_{lm}(\hat{r})). \quad (6.8)$$

Na forma em que estão, as Eqs. 6.7 e 6.8 se referem a sistemas clássicos. No caso de um sistema quântico como um núcleo a densidade de magnetização e a densidade de corrente devem ser reinterpretadas como variáveis dinâmicas (operadores) cuja forma depende do modelo adotado para descrever o sistema. O modelo mais simples considera o núcleo como uma coleção de fermions puntiformes de spin 1/2 com momentos magnéticos intrínsecos associados ao spin e carga  $e(1/2 + t_3^{(i)})$ . Nesse modelo existem *correntes de convecção*  $\vec{j}_c(\vec{r})$  associadas ao movimento das cargas e *correntes de magnetização*  $\vec{j}_s(\vec{r})$  associadas aos momentos magnéticos intrínsecos e portanto aos spins. As correntes de convecção podem ser descritas pelo operador

$$\vec{j}_c(\vec{r}) = \frac{e}{2} \sum_i \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right) [\delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \vec{v}_i + \vec{v}_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)] \quad (6.9)$$

onde a simetrização dentro dos colchetes é introduzida para assegurar a hermiticidade da corrente em vista da não comutatividade da posição com a velocidade  $\vec{v}_i$  dos prótons. A forma desse operador velocidade depende a rigor da dinâmica do sistema nuclear, como pode ser visto na equação de Heisenberg

$$\vec{v}_i = \dot{\vec{r}}_i = \frac{1}{i\hbar} [\vec{r}_i, H].$$

No caso de um modelo de partículas independentes num potencial independente de momento ela dá simplesmente  $\vec{v}_i = \vec{p}_i/m$ , mas em modelos mais sofisticados, incluindo interações residuais mais realísticas de dois corpos esse operador deverá eventualmente incluir até mesmo termos também de dois corpos. O que está por trás dessa dependencia das correntes com a dinâmica nuclear é em última análise a conservação de carga, como pode ser visto da equação de continuidade

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j}(\vec{r}) = -\frac{d\rho(\vec{r})}{dt} = \frac{i}{\hbar} [\rho(\vec{r}), H].$$

Quanto aos efeitos devidos aos momentos magnéticos intrínsecos, a forma mais simples de incluí-los consiste em definir uma magnetização intrínseca através do operador

$$\vec{\mu}_s(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \left[ \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right) \vec{\mu}_p + \left( \frac{1}{2} - t_3^{(i)} \right) \vec{\mu}_n \right] \quad (6.10)$$

a ser usada em conexão com a Eq. 6.7, onde

$$\vec{\mu}_{p,n} = \frac{e\hbar}{2mc} g_{p,n} \frac{\vec{s}}{\hbar}.$$

Aqui  $\vec{s}$  é o operador de spin e os fatores  $g_p$  e  $g_n$  são os fatores giromagnéticos que medem os momentos magnéticos do próton e do nêutron em unidades do magneton nuclear  $e\hbar/2mc$ . Os seus valores experimentais para nucleons livres são

$$\begin{aligned} g_p &= +5.586 \\ g_n &= -3.826 \end{aligned}$$

e o que se faz usualmente é usar esses valores também para os nucleons no meio nuclear. Isso ignora, porém, a possibilidade de efeitos de estrutura subnuclear que podem em princípio existir nesse meio, mas que não podem ser estimados quantitativamente dado o estado atual da arte.

Usando as expressões 6.9 (com  $\vec{v}_i = \vec{p}_i/m$  e lembrando que  $\vec{r}_i \times \vec{p}_i = \vec{l}_i$ ) e 6.10, juntamente com a 6.7 e 6.8 respectivamente, as expressões que resultam para a contribuição das correntes de convecção e da densidade de magnetização intrínseca para os momentos multipolares magnéticos são

$$\hat{\mathcal{M}}_{lm}^{m,c} = \frac{e\hbar}{2mc} \frac{1}{l+1} \int d\vec{r} \sum_i \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right) \left[ \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \frac{\vec{l}_i}{\hbar} + \frac{\vec{l}_i}{\hbar} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \right] \vec{\nabla} \left( r^l Y_{lm}(\hat{r}) \right) \quad (6.11)$$

e

$$\hat{\mathcal{M}}_{lm}^{m,s} = \frac{e\hbar}{2mc} \sum_i \left[ \left( \frac{1}{2} + t_3^{(i)} \right) g_p + \left( \frac{1}{2} - t_3^{(i)} \right) g_n \right] \frac{\vec{s}_i}{\hbar} \cdot \vec{\nabla} \left( r_i^l Y_{lm}(\hat{r}_i) \right). \quad (6.12)$$

Esses objetos são tensores de Racah de ordem  $l$ , e portanto as observações feitas sobre elementos de matriz entre estados nucleares com momento angular bem definido para o caso dos multipolos elétricos se aplicam também neste caso. Os números convencionalmente chamados momentos multipolares magnéticos estáticos são também valores médios dos  $\hat{\mathcal{M}}_{l0}^m$  tomados entre vetores de estado com projeção do momento angular total máxima na direção  $z$ .

## 6.2 Interação com a radiação

1. Descrição do campo eletromagnético transverso no padrão de Coulomb e quantização. (Notas antigas de MQ).

2. Acoplamento mínimo, tratamento perturbativo, aproximação de dipolo elétrico. (Notas antigas de MQ).

3. Expansão multipolar do campo transverso: multipolos elétricos e magnéticos. Inclusão de efeitos dos momentos magnéticos intrínsecos. (Notas antigas de MQ).

4. Redução no limite de grandes comprimentos de onda: reobtenção das expressões para os momentos estáticos. Dependência limite dos multipolos elétricos apenas com a densidade de carga (teorema de Siegert).

Última expressão das notas antigas para multipolos elétricos:

$$T_{J\mu}^E(k) = \frac{1}{k} \int d\vec{r} [\nabla \times j_J(kr) \vec{\mathcal{Y}}_{J1J\mu}(\hat{r})] \cdot \left[ \psi_f^*(\vec{r}) \frac{\vec{v}}{c} \psi_i(\vec{r}) \right].$$

Os termos contendo as harmônicas esféricas vetoriais podem ser re-expressos em termos de  $Y_{lm}$  normais usando

$$j_J(kr) \vec{\mathcal{Y}}_{J1J\mu}(\hat{r}) = \frac{-i}{\sqrt{J(J+1)}} (\vec{r} \times \nabla) j_J(kr) Y_{lm}(\hat{r}).$$

Isso dá origem a  $\nabla \times (\vec{r} \times \nabla) j_J Y_{lm}$  que pode ser aberto em dois termos. Um deles contém, depois de uma integração por partes,  $\nabla \cdot \vec{v}/c$  que via equação de continuidade pode ser expresso em termos da densidade de carga. Usando a expressão de  $j_J(kr)$  para  $kr \ll 1$  resulta a expressão estática para o multipolo.

## Capítulo 7

# Fenomenologia de rotações e vibrações coletivas

A necessidade de recorrer a graus de liberdade de natureza coletiva (em oposição aos graus de liberdade de partícula, sobre os quais se baseia o modelo de camadas) apareceu já na análise das correções de camada à fórmula de massa (por exemplo, na versão de Myers e Swiatecki, descrita no Capítulo 2). Ela se manifesta novamente na comparação dos valores medidos dos momentos eletromagnéticos estáticos (especialmente o momento de quadrupolo elétrico) e das probabilidades de transições radiativas. Em termos microscópicos, os efeitos coletivos devem ser pensados como associados a correlações (entre as quais as de emparelhamento, mas incluindo também outros tipos de correlação, em particular de longo alcance) envolvendo vários nucleons. O seu tratamento neste contexto envolve a necessidade de usar técnicas da teoria de sistemas de muitos corpos capazes de incluir a descrição das correlações relevantes a partir de bases de estados de partícula independente. Essas técnicas serão porém tratadas apenas eventualmente e de forma tangencial aqui, em favor de um arcabouço fenomenológico desenvolvido basicamente por A. Bohr e B. Mottelson nas décadas de 50 e 60. Esse arcabouço na realidade *não exclui* uma possível realização em termos microscópicos, donde provém em boa parte a sua grande utilidade e popularidade.

O ponto de partida do tratamento consiste em notar que o modelo microscópico padrão para a estrutura nuclear, que é o modelo de camadas, pressupõe de partida um ingrediente coletivo essencial que é o “campo médio” que liga os nucleons; e considerar como variáveis coletivas básicas (fenomenológicas) um conjunto de parâmetros que servem para caracterizar a “geometria” desse campo médio. Isso certamente introduz variáveis redundantes na descrição, na medida em que ela inclua também as variáveis dinâmicas dos nucleons, pois estes não só estão sujeitos ao campo médio como também lhe dão origem. Isso levará à necessidade de introduzir condições subsidiárias vinculando as duas classes de variáveis dinâmicas entre si. A

introdução explícita das variáveis coletivas permite, por outro lado, uma descrição econômica e eficiente de propriedades coletivas de tipo vibracional e rotacional observadas nos espectros nucleares.

## 7.1 Cinemática do campo médio: rotações e vibrações.

Uma forma geral conveniente de descrever a forma de um campo médio sem simetria esférica consiste em partir de um campo médio central  $V(r)$  e introduzir um re-escalamento geral, dependente dos ângulos  $\hat{r}$  do vetor de posição considerado  $\vec{r}$ , expandido em harmônicas esféricas:

$$V(r) \rightarrow V(\vec{r}) = V\left(\frac{r}{1 + \sum_{lm} \alpha_{lm} Y_{lm}(\hat{r})}\right). \quad (7.1)$$

Isso faz com que uma equipotencial genérica (e em particular a que seja tomada como definindo o “raio” nuclear  $R$ ) seja descrita pela expansão

$$R(\vec{r}) = R_0 \left[ 1 + \sum_{lm} \alpha_{lm} Y_{lm}(\hat{r}) \right]. \quad (7.2)$$

Os parâmetros coletivos associados a essa descrição são os coeficientes (em geral complexos)  $\alpha_{lm}$ . Eles devem ser escolhidos de tal forma que  $R(\vec{r})$  seja *real*, o que faz com que eles não sejam todos independentes. De fato, a condição  $R(\vec{r}) = R^*(\vec{r})$ , juntamente com as propriedades de conjugação complexa das harmônicas esféricas, dá

$$\alpha_{lm}^* = (-1)^m \alpha_{l-m} \quad (7.3)$$

de modo que os  $\alpha_{l0}$  são reais e os  $\alpha_{l-m}$  com  $m > 0$  sejam determinados pelos correspondentes  $\alpha_{lm}$ .

O termo com  $l = 0$  corresponde a um re-escalamento radial isotrópico de potencial, e os termos com  $l = 1$  correspondem (para  $|\alpha_{1m}| \ll 1$ ) a uma translação do potencial. As deformações mais simples da esfericidade correspondem portanto às deformações quadrupolares  $\alpha_{2m}$ , que são as consideradas na versão usual mais simples do tratamento de Bohr e Mottelson para “núcleos deformados”. Neste caso a forma da superfície nuclear é descrita *no laboratório* pela versão truncada da Eq. 7.2

$$R(\vec{r}) = R_0 \left[ 1 + \sum_m \alpha_{2m} Y_{2m}(\hat{r}) \right]. \quad (7.4)$$

Nesse sistema de referência a rotação e vibração do potencial podem ser descritos através da dependência temporal dos parâmetros coletivos (respeitando sempre a condição de realidade

7.3). No caso de uma forma não esférica de equilíbrio (com relação a excitações vibracionais) é possível e conveniente eliminar a dependência temporal associada à *rotação* do potencial deformado passando para um sistema de referência *intrínseco*, que roda com o potencial deformado e é caracterizado em cada instante por um conjunto de três ângulos de Euler  $\omega_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Usando a propriedade de unitariedade das matrizes de rotação

$$\sum_m D_{mm'}^{2*}(\omega_i) D_{mm''}^2(\omega_i) = \delta_{m'm''}$$

a soma de 7.4 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \sum_m \alpha_{2m} Y_{2m}(\hat{r}) &= \sum_{mm'm''} D_{mm'}^{2*}(\omega_i) \alpha_{2m'} D_{mm''}^2(\omega_i) Y_{2m''}(\hat{r}) \\ &= \sum_m \alpha'_{2m} Y_{2m}(\hat{r}') \end{aligned}$$

onde  $\hat{r}'$  indica a direção de  $\vec{r}$  com relação ao sistema de referência intrínseco e os novos coeficientes são dados por

$$\alpha'_{2m} = \sum_{m'} D_{mm'}^{2*}(\omega_i) \alpha_{2m'} \quad (7.5)$$

o que mostra em particular que os  $\alpha_{2m}^*$  são um tensor de Racah de ordem 2. Para um sistema permanentemente deformado em rotação, essa transformação substitui a dependência temporal dos parâmetros de deformação no laboratório pela dependência temporal dos ângulos de Euler  $\omega_i(t)$  que definem em cada instante a orientação do referencial intrínseco no sistema de laboratório. Levando em conta a condição de realidade 7.3 (que evidentemente deve se verificar também no sistema intrínseco), a deformação quadrupolar depende de cinco parâmetros reais, que podem ser tomados como sendo  $\alpha'_{20}$  (real),  $\alpha'_{21}$  e  $\alpha'_{22}$  (complexos).

Uma simplificação considerável na descrição das deformações quadrupolares pode ser conseguida restringindo-as de forma a considerar apenas sistemas que têm um plano de simetria, que será tomado como o plano  $x', y'$  (no sistema intrínseco). Introduzida originalmente também por Bohr e Mottelson, essa hipótese é consistente com a fenomenologia das deformações quadrupolares de sistemas nucleares. Escrevendo a Eq. 7.4 no sistema intrínseco

$$R(\theta', \phi') = R_0 \left[ 1 + \sum_m \alpha'_{2m} Y_{2m}(\theta', \phi') \right], \quad (7.6)$$

onde  $\theta', \phi'$  são a colatitude e o ângulo azimutal intrínsecos, essa simetria é definida pela condição

$$R(\theta', \phi') = R(\pi - \theta', \phi') \quad (7.7)$$

que introduz restrições adicionais para as amplitudes  $\alpha'_{lm}$ . Estas podem ser explicitadas considerando separadamente as contribuições dos termos com  $|m| = 0, 1$  e  $2$  para a Eq. 7.6:

1)  $m = 0$ . Neste caso  $Y_{20}(\theta', \phi')$  é na realidade independente de  $\phi'$  e função par de  $\cos(\theta')$ , de modo que um valor arbitrário de  $\alpha'_{20}$  é consistente com a condição 7.7.

2)  $|m| = 1$ . Neste caso a contribuição para a 7.6 é, usando a condição de realidade,

$$\begin{aligned}\alpha'_{21}Y_{21}(\theta', \phi') - \alpha'^*_{21}Y_{2-1}(\theta', \phi') &= \alpha'_{21}Y_{21}(\theta', \phi') + \alpha'^*_{21}Y_{21}^*(\theta', \phi') \\ &= 2 \operatorname{Re} \alpha'_{21}Y_{21}(\theta', \phi').\end{aligned}$$

Mas  $Y_{21}(\theta', \phi')$  é proporcional a  $e^{i\phi'} P_2^1(\cos \theta')$ , sendo que o polinômio associado de Legendre  $P_2^1$  é uma função ímpar de seu argumento. Logo estes termos violam a condição 7.7, o que leva à condição  $\alpha'_{21} = 0$  para que ela seja válida.

3)  $|m| = 2$ . Procedendo como no caso  $|m| = 1$  o que se obtém neste caso é

$$\alpha'_{22}Y_{22}(\theta', \phi') + \alpha'^*_{22}Y_{22}^*(\theta', \phi') = 2 \operatorname{Re} \alpha'_{22}Y_{22}(\theta', \phi') \propto 2 |\alpha'_{22}| P_2^2(\cos \theta') \cos(2\phi' + \delta_2)$$

onde a amplitude complexa  $\alpha'_{22}$  foi escrita em forma polar como  $|\alpha'_{22}| \exp(i\delta_2)$ . Como neste caso o polinômio associado de Legendre é uma função par de seu argumento, estes termos são em geral consistentes com a simetria 7.7. A última relação acima mostra ainda, contudo, que a fase da amplitude complexa  $\alpha'_{22}$  corresponde em geral a uma escolha dos eixos  $x'$  e  $y'$  que não coincide com os eixos principais do sistema deformado. Portanto, com a escolha conveniente em que esses eixos de fato coincidem com os eixos principais, é possível tomar  $\alpha'_{22}$  como sendo *real*, sem que isso implique em qualquer perda de generalidade.

Como resultado desta discussão, no caso em que o sistema deformado tem simetria de reflexão no plano  $x', y'$ , os cinco parâmetros reais que caracterizam em geral as deformações quadrupolares intrínsecas podem ser reduzidos a apenas dois parâmetros reais  $a_0 = \alpha'_{20}$  e  $a_2 = |\alpha'_{22}|$ . É conveniente e usual substituir ainda esses dois parâmetros por dois outros definidos por Bohr e Mottelson como

$$\begin{aligned}a_0 &= \beta \cos \gamma \\ a_2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma, \quad \beta \geq 0\end{aligned}$$

com o que a função intrínseca de deformação pode ser escrita explicitamente como

$$\begin{aligned} \left[ \frac{R(\theta', \phi')}{R_0} - 1 \right] &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left[ a_0 (3 \cos^2 \theta' - 1) + a_2 \sqrt{6} \sin^2 \theta' \cos 2\phi' \right] \\ &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}} \left[ \beta \cos \gamma (3 \cos^2 \theta' - 1) + \sqrt{3} \beta \sin \gamma \sin^2 \theta' \cos 2\phi' \right]. \end{aligned} \quad (7.8)$$

Desta última expressão é possível obter expressões para o comprimento dos semi-eixos principais do elipsóide em termos de  $\beta$  e  $\gamma$ . Chamando  $R_{x'}$ ,  $R_{y'}$ ,  $R_{z'}$  de  $R_k$  com  $k = 1, 2, 3$  respectivamente resulta

$$R_k = R_0 \left[ 1 + \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \beta \cos \left( \gamma - \frac{2\pi k}{3} \right) \right].$$

A utilidade da parametrização em termos de  $\beta$  e  $\gamma$  consiste em que *todas* as diferentes deformações quadrupolares com simetria de reflexão podem ser representadas no setor angular  $0 \leq \gamma \leq \pi/3$ , com uma numeração adequada dos eixos e usando a simetria imposta. Como pode ser visto explicitamente na Eq. 7.8,  $\gamma = 0$  corresponde a deformações que, além da simetria de reflexão, têm ainda simetria axial em torno do eixo  $z'$ .

## 7.2 Dinâmica de vibrações de núcleos esféricos

Uma primeira aplicação da cinemática coletiva introduzida na seção anterior consiste em considerar a dinâmica de pequenas deformações de um sistema nuclear que é esférico no seu estado de equilíbrio, isto é, tal que as amplitudes  $\alpha_{lm}$  (v. Eq. 7.2) tenham valores nulos numa situação de equilíbrio *estável* do sistema. A condição de *pequenas* deformações é invocada no sentido de supor que a dinâmica seja *linear*, e portanto equivalente a um sistema de osciladores harmônicos independentes que constituem os modos normais de vibração do sistema. O problema dos modos normais de vibração de uma gota clássica cuja forma de equilíbrio esférica resulta da minimização da energia de superfície (descrita em termos do coeficiente de tensão superficial) foi estudado no século passado por Lord Rayleigh, e mostra que os  $\alpha_{lm}$  são na realidade os modos normais da gota. Isso significa que no regime de pequenas amplitudes eles satisfazem equações de movimento clássicas do tipo

$$B_l \ddot{\alpha}_{lm}(t) + C_l \alpha_{lm}(t) = 0 \quad (7.9)$$

onde  $B_l$  é um coeficiente que caracteriza a inércia do modo enquanto  $C_l$  caracteriza a respectiva força de restituição. A quantização dessas vibrações coletivas pode ser feita facilmente notando que as equações de movimento 7.9 podem ser obtidas de Hamiltonianas

$$H_l = \sum_{m \geq 0} \left[ \frac{1}{2B_l} |\Pi_{lm}|^2 + \frac{C_l}{2} |\alpha_{lm}|^2 \right]. \quad (7.10)$$

Como para  $m \neq 0$  as amplitudes  $\alpha_{lm}$  (e portanto também suas derivadas) são complexas, os momentos canônicos são definidos pela relação

$$\Pi_{lm} = B_l \dot{\alpha}_{lm}^* = (-1)^m B_l \dot{\alpha}_{l-m}.$$

A quantização se faz então sem dificuldade reinterprestando os  $\Pi_{lm}$  e  $\alpha_{lm}$  como operadores que satisfazem as relações de comutação canônicas

$$[\alpha_{lm}, \Pi_{lm'}] = i\hbar \delta_{mm'}. \quad (7.11)$$

Essas variáveis dinâmicas podem ainda ser expressas em termos de operadores de criação e de aniquilação  $a_{lm}^\dagger$  e  $a_{lm}$  definidos pela transformação

$$\begin{aligned} \alpha_{lm} &= \left[ \frac{\hbar}{2\sqrt{B_l C_l}} \right]^{1/2} [a_{lm} + (-1)^m a_{l-m}^\dagger] = (-1)^m \alpha_{l-m}^\dagger \\ \Pi_{lm} &= i \left[ \frac{\hbar \sqrt{B_l C_l}}{2} \right]^{1/2} [a_{lm}^\dagger - (-1)^m a_{l-m}]. \end{aligned} \quad (7.12)$$

De fato, levando as definições 7.12 às relações de comutação 7.11 resulta que

$$[a_{lm}, a_{lm'}^\dagger] = \delta_{mm'}; \quad [a_{lm}, a_{lm'}] = 0. \quad (7.13)$$

Elas também reduzem a Hamiltoniana  $H_l$  à forma usual

$$H_l = \sum_{m=-l}^l \hbar \omega_l \left( a_{lm}^\dagger a_{lm} + \frac{1}{2} \right) \quad (7.14)$$

com  $\omega_l = \sqrt{C_l/B_l}$ .

O espectro e os autovetores dessa Hamiltoniana coletiva podem ser deduzidos das propriedades algébricas dos operadores de criação e de aniquilação exatamente como no caso do oscilador harmônico simples. O estado fundamental  $|0\rangle$  é aniquilado pelos  $a_{lm}$ , isto é

$$a_{lm}|0\rangle = 0.$$

Consistentemente com a suposta esfericidade do estado de equilíbrio do sistema nuclear, é razoável tomar esse estado como invariante por rotações e portanto como tendo momento angular zero. O espectro restante consiste em uma série de níveis igualmente espaçados com espaçamento  $\hbar\omega_l$ , e os respectivos autovetores são obtidos através da aplicação de operadores de criação sobre o estado fundamental. Uma propriedade importante desses estados está ligada ao fato, mostrado na seção anterior, de que os  $\alpha_{lm}^*$  (e portanto, depois da quantização, os  $\alpha_{lm}^\dagger$  e também os  $a_{lm}^\dagger$ ) constituem um tensor de Racah de ordem  $l$ . Disso resulta, de fato, que os estados excitados degenerados

$$|lm\rangle = a_{lm}^\dagger|0\rangle, \quad -l \leq m \leq l$$

correspondem aos sub-estados magnéticos de um nível de momento angular  $l$ . A paridade associada a esse nível, por outro lado, pode ser determinada a partir das propriedades de transformação dos  $a_{lm}^\dagger$  sob inversão, que são determinadas pelas propriedades correspondentes das harmônicas esféricas. Isso determina a paridade desses estados como sendo  $(-1)^l$ . É usual dizer que os  $a_{lm}^\dagger$  criam *fonons de multipolaridade  $l$*  e paridade  $(-1)^l$ , e que esse nível, com energia de excitação  $\hbar\omega_l$ , é o *nível de um fonon* dessa multipolaridade. O nível de dois fonons corresponde ao conjunto de estado degenerados que se obtém aplicando dois operadores de criação sobre o estado fundamental:

$$|lmlm'\rangle = \frac{1}{\sqrt{1 + \delta_{mm'}}} a_{lm}^\dagger a_{lm'}^\dagger |0\rangle$$

onde o fator inicial garante a normalização dos estados. Eles têm paridade sempre positiva  $(-1)^{2l}$  mas não têm um momento angular *total* bem definido. Estados de dois fonons com momento angular total bem definido podem no entanto ser construídos a partir destes estados acoplando os momentos angulares dos dois fonons da forma usual, com coeficientes de Clebsch-Gordan. O estado normalizado de dois fonons, com momento angular total  $J$ , e projeção  $M$  no eixo de quantização do momento angular se escreve portanto como

$$|llJM\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{mm'} C_{mm'M}^{llJ} a_{lm}^\dagger a_{lm'}^\dagger |0\rangle.$$

Existe uma restrição importante sobre os possíveis valores de  $J$  nessa última equação que provém do caráter bosônico dos fonons, ligado em última análise às relações de comutação 7.13. Devido a essas relações, de fato, o estado  $|llJM\rangle$  não se altera se a ordem dos dois operadores de

criação que aparecem do lado direito da equação for invertida. Com uma redefinição dos índices mudos  $m$  e  $m'$ , no entanto, isso equivale ainda a substituir o coeficiente de Clebsch-Gordan por

$$C_{m'mM}^{lJ} = (-1)^{2l-J} C_{mm'M}^{lJ}$$

o que equivale por sua vez a multiplicar o estado pelo fator de fase que relaciona os dois coeficientes. Como  $l$  e  $J$  são inteiros, esse fator se reduz a  $(-1)^J$  que deve ser igual a 1 para que o estado não se anule. Isso mostra que o caráter bosônico dos fonons restringe o momento angular total de estados de dois fonons a valores *pares* somente. Restrições com essa mesma origem, mas de expressão menos simples, existem também para estados de tres ou mais fonons (por exemplo, os valores possíveis do momento angular total e paridade para o nível de tres fonons com  $l = 2$  são  $J^\pi = 0^+, 2^+, 3^+, 4^+$  e  $6^+$ ).

**Momentos estáticos e probabilidades de transições radiativas.** Para que seja possível analisar propriedades eletromagnéticas de núcleos em termos deste modelo coletivo é preciso em primeiro lugar definir, no contexto do modelo, as densidades de carga e corrente de que dependem essas propriedades. A opção mais simples para a distribuição de cargas (que, como visto no capítulo anterior, define os momentos multipolares elétricos estáticos) consiste em supor, na situação de equilíbrio (isto é, no estado fundamental correspondente à versão quantizada do modelo) uma distribuição uniforme de cargas limitada por uma superfície esférica de raio  $R_0$ ; e em geral uma distribuição uniforme de cargas dentro do volume definido pela superfície deformada descrita pela Eq. 7.2. Essa suposição pode certamente ser modificada de várias maneiras (por exemplo, usando os parâmetros  $\alpha_{lm}$  para definir um escalonamento, nos moldes da Eq. 7.1, de uma distribuição de cargas mais “realística” para o estado fundamental), e tal flexibilidade (ou ambiguidade na definição inicial do modelo) constitui, conforme o ponto de vista que se queira adotar, uma característica atraente ou uma limitação intrínseca dos tratamentos fortemente fenomenológicos. Na sua forma mais simples ela torna o cálculo dos momentos multipolares elétricos estáticos imediato. De fato, a Eq. 6.2 fica neste caso

$$\mathcal{M}_{lm} = \rho_0 \int d\vec{r} r^l Y_{lm}(\hat{r}) \theta[R(\hat{r}) - r]$$

onde  $\rho_0$  é a densidade de carga (constante),  $\theta[x]$  é a função degrau, definida como 1 para  $x > 0$  e zero para  $x < 0$ , e  $R(\hat{r})$  no argumento dessa função é dada pela expressão 7.2. A integração na variável radial pode ser feita facilmente dando para a integração sobre os ângulos

$$\int d\hat{r} \frac{R(\hat{r})^{l+3}}{l+3} Y_{lm}(\hat{r}).$$

Dentro da aproximação de deformações de pequena amplitude a potência de  $R$  pode ser linearizada nos coeficientes  $\alpha_{lm}$ , o que então permite fazer imediatamente a integração usando a ortogonalidade dos  $Y_{lm}(\hat{r})$ . O que se obtém desse modo é

$$\mathcal{M}_{lm}^e = \rho_0 R_0^{l+3} (-1)^m \alpha_{l-m} = \frac{3}{4\pi} Z e R_0^l \alpha_{lm}^\dagger \quad (7.15)$$

em que foi usada a condição de realidade 7.3 e a expressão  $\rho_0 = [3Ze/4\pi R_0^3]$  para a densidade de carga.

Uma consequência direta desse resultado é que momentos multipolares elétricos estáticos se anulam neste modelo. De fato, pela Eq. 7.12 cada um dos termos de  $\alpha_{lm}^\dagger$  sempre cria ou aniquila um fonon, e tem portanto valor esperado nulo em qualquer estado caracterizado por um número definido de fonons, como são os autoestados da Hamiltoniana coletiva 7.14.

Os momentos magnéticos estáticos, por outro lado, dependem da densidade de corrente  $\vec{j}(\vec{r})$  (v. Eq. 6.8), sobre a qual o modelo é ainda mais incerto que em relação à densidade de carga. Usando hipóteses hidrodinâmicas suficientes para deduzir classicamente as equações de movimento 7.9 (fluido incompressível e movimento irrotacional) é possível deduzir expressões para os  $\mathcal{M}_{lm}^m$  em termos dos  $\alpha_{lm}$  e dos  $\dot{\alpha}_{lm}$  (v. S. A. Williams, Phys. Rev. **125**, 340 (1962) e J. P. Davidson, Collective Models of the Nucleus, Academic Press, N.Y., 1968, Cap. 6). No caso particular do momento de dipolo magnético, o gradiente que aparece na Eq. 6.8 pode ser calculado explicitamente como

$$\nabla r Y_{1m}(\hat{r}) = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \hat{u}_m$$

onde os  $\hat{u}_m$  são os versores complexos (cf. Eq. A.15)

$$\begin{aligned} \hat{u}_0 &= \hat{z} \\ \hat{u}_{\pm 1} &= \mp \frac{\hat{x} \pm i\hat{y}}{\sqrt{2}} \end{aligned}$$

que resultam do gradiente das componentes esféricas do vetor  $\vec{r}$  (v. Apêndice A). Desse modo, a componente com  $m$  do momento de dipolo magnético pode ser escrita

$$\begin{aligned} \mathcal{M}_{1m}^m &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{1}{2c} \int d\vec{r} [\vec{r} \times \vec{j}(\vec{r})] \cdot \hat{u}_m = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{Z}{A} \frac{e\hbar}{2mc} \int d\vec{r} \frac{1}{\hbar} [\vec{r} \times m\vec{v}(\vec{r})] \cdot \hat{u}_m \\ &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \frac{Z}{A} \frac{e\hbar}{2mc} \frac{J_m}{\hbar}. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Essa expressão mostra a esperada proporcionalidade entre  $\mathcal{M}_{1m}^m$  e as componentes esféricas do momento angular, e identifica o fator giromagnético  $g_c = Z/A$ .

As expressões 7.15 e 7.16 são também úteis para calcular a probabilidade de transições radiativas no limite de grandes comprimentos de onda  $kR_0 \ll 1$ , sendo  $\vec{k}$  o vetor de onda do foton, que é amplamente verificado nas transições nucleares de baixa energia. Como a Hamiltoniana coletiva é invariante por rotações, os operadores  $\mathcal{M}_{1m}^m$  são têm elementos de matriz nulos entre estados de energia diferente, o que significa que transições de dipolo magnético são proibidas. Por outro lado, como os  $\alpha_{lm}^\dagger$  são uma combinação de operadores de criação e de aniquilação de fonons, transições elétricas de multipolaridade  $l$  são permitidas (em ordem mais baixa) apenas entre estados que diferem em um fonon dessa multipolaridade.

Discussão de dados. Vibradores quadrupolares, tripleto de dois fonons, transições. Fonons octupolares.

### 7.3 Dinâmica de sistemas permanentemente deformados

Uma segunda aplicação importante da cinemática coletiva da seção 7.1 consiste em considerar um sistema nuclear com uma deformação quadrupolar intrínseca de equilíbrio. Nesse caso, chamando  $a_0$  e  $a_2$  os valores de equilíbrio de  $\alpha'_{20}$  e  $|\alpha'_{22}|$  respectivamente, a parte de energia potencial da Hamiltoniana coletiva 7.10 pode ser escrita, mantendo a aproximação linear usada nessa equação mas admitindo a possibilidade de ter constantes elásticas diferentes para os dois modos intrínsecos, como

$$V(\beta, \gamma) = \frac{C_0}{2}(\beta \cos \gamma - a_0)^2 + \frac{C_2}{2}\left(\frac{\beta \sin \gamma}{\sqrt{2}} - a_2\right)^2. \quad (7.17)$$

O mínimo desse potencial define os valores de equilíbrio  $\beta_0$  e  $\gamma_0$  em termos de  $a_0$  e de  $a_2$ . A transformação para as variáveis intrínsecas da parte de energia cinética envolve um cálculo trabalhoso que leva ao resultado

$$\frac{1}{2B_2} \sum_m |\Pi_{2m}|^2 = \frac{B_2}{2} \sum_m |\dot{\alpha}_{lm}|^2 = \sum_{k=1}^3 \frac{\mathcal{I}_k}{2} \Omega_k^2 + \frac{B_2}{2} (\dot{\beta}^2 + \beta^2 \dot{\gamma}^2) \quad (7.18)$$

onde  $k = 1, 2, 3$  se refere aos eixos intrínsecos e  $\Omega_k$  são as componentes da velocidade angular de rotação do sistema deformado ao longo desses eixos. Os  $\mathcal{I}_k$  são momentos de inércia que aparecem dados em termos de  $B_2$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  como

$$\mathcal{I}_k = 4B_2\beta^2 \sin^2 \left( \gamma - \frac{2\pi k}{3} \right). \quad (7.19)$$

Independentemente do valor que se atribua a  $B_2$ , e supondo que o mínimo da energia potencial de deformação em  $\beta_0$ ,  $\gamma_0$  seja suficientemente profundo para que esses parametros de deformação

possam ser tomados como constantes, os momentos de inércia 7.19 diferem radicalmente dos momentos de inércia de um elipsoide rígido. De fato, no caso de deformação nula os  $\mathcal{I}_k$  se anulam, enquanto que os momentos de inércia rígidos se reduzem ao valor correspondente a uma esfera ( $2MR_0^2/5$ ), que é na realidade a contribuição dominante também para pequenas deformações do sistema rígido. A determinação de  $B_2$ , por outro lado, depende de hipóteses sobre a natureza do campo de velocidades associado ao movimento coletivo do sistema. A hipótese mais simples e usual, de movimento irrotacional (isto é, tal que  $\nabla \times \vec{v}(\vec{r}) = 0$ ) de um fluido incompressível (isto é,  $\partial\rho/\partial t = 0$ ) dá, para o modo de multipolaridade geral  $l$ ,

$$B_l \rightarrow \frac{3}{4\pi l} mAR_0^2$$

onde  $m$  é a massa do nucleon e portanto  $mA = M$  é a massa total. Como será visto na análise dos espectros nucleares rotacionais, os valores empíricos que se deve associar aos momentos de inércia nucleares são sistematicamente *maiores* que o valor irrotacional (por um fator 2 ou 3), ao passo que são também sistematicamente *menores* que o valor rígido (também por um fator aproximadamente 2). Isso certamente limita a utilidade da Eq. 7.18 aos seus aspectos qualitativos e, em particular indica o caráter *não irrotacional* do campo de velocidades associado a rotações nucleares.

# Apêndice A

## A.1 Momento angular e Rotações

### A.1.1 Acoplamento e reacoplamento de momentos angulares

O momento angular desempenha para o trabalho com sistemas finitos de muitos corpos um papel semelhante ao que cabe ao momento linear no caso de sistemas extensos, na medida em que a invariância rotacional desempenha neste caso um papel simplificador análogo ao desempenhado pela invariância translacional no caso de sistemas extensos. Rotações são no entanto transformações mais complicadas que translações por estarem associadas a uma estrutura de grupo *não abeliano*, i.e., não comutativo. Uma boa parte da teoria quântica do momento angular tem diretamente a ver com propriedades de representações irredutíveis do grupo das rotações que tem em geral dimensão finita mas arbitrariamente grande.

**Relações de comutação.** Uma forma geral de caracterizar o momento angular quântico é através das propriedades algébricas (regras de comutação) dos operadores associados a essa variável dinâmica. Estas podem ser obtidas “por correspondência” dos operadores associados ao momento angular clássico  $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$  com a substituição usual  $\vec{p} \rightarrow (\hbar/i)\nabla$ . As três componentes  $L_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  desse operador obedecem às relações de comutação

$$[L_j, L_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}L_l$$

onde  $\epsilon_{jkl}$  é o símbolo antissimétrico usual associado e.g. ao produto vetorial. As propriedades específicas desses operadores  $L_j$ , no entanto, dependem não apenas das relações de comutação mas *também* do fato de serem eles realizados como operadores diferenciais num espaço de funções. De uma forma mais geral, é possível *definir* operadores de momento angular através de relações de comutação *apenas*, independentemente de qualquer representação particular. Dessa forma um operador de momento angular  $\vec{J}$  com componentes  $J_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  será definido apenas impondo sobre essas componentes relações de comutação semelhantes às que valem para as  $L_i$ :

$$[J_j, J_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}J_l. \quad (\text{A.1})$$

O fato de que existem realizações dessas relações de comutação que não são redutíveis à forma diferencial válida para o momento angular orbital é exemplificado pelas matrizes de Pauli (que descrevem um spin 1/2).

Como as componentes  $J_j$  não comutam entre si não podem ser diagonalizadas simultaneamente. No entanto  $\vec{J}^2 = J_1^2 + J_2^2 + J_3^2$  comuta com qualquer das tres componentes

$$[\vec{J}^2, J_j] = 0 \quad (\text{A.2})$$

e portanto pode ser diagonalizado simultaneamente com uma delas. Como é feito de costume escolhemos o par  $\vec{J}^2$  e  $J_3$  para isso e chamamos  $|J, M\rangle$  os autovetores simultâneos desse dois operadores.

**Autovalores e autovetores.** Seja  $\hbar M$  um autovalor de  $J_3$ , i.e.

$$J_3 |J, M\rangle = \hbar M |J, M\rangle. \quad (\text{A.3})$$

A partir desse autovalor (e autovetor) é possível obter outros através dos operadores

$$J_{\pm} = J_1 \pm J_2.$$

De fato, usando as relações de comutação Eq. A.1 é fácil verificar que

$$J_3[J_{\pm} |J, M\rangle] = \hbar(M \pm 1)[J_{\pm} |J, M\rangle] \quad (\text{A.4})$$

que identifica novos autovetores de  $J_3$  com os respectivos autovalores. A norma desses novos autovetores é

$$\langle J, M | J_{\mp} J_{\pm} |J, M\rangle = \langle J, M | (\vec{J}^2 - J_3^2 \mp \hbar J_3) |J, M\rangle = \langle J, M | \vec{J}^2 |J, M\rangle - \hbar^2 M(M \pm 1)$$

que deve ser uma quantidade positiva para qualquer vetor não nulo (e zero para o vetor nulo). Portanto

$$|\hbar^2 M(M \pm 1)| \leq \langle J, M | \vec{J}^2 |J, M\rangle$$

onde o elemento de matriz do lado direito nada mais é que o autovalor de  $\vec{J}^2$  associado ao autovetor  $|J, M\rangle$ . Para que isso ocorra é preciso que esse autovalor seja  $\hbar^2 J(J+1)$  e que  $-J \leq M \leq J$ . Os novos autovetores obtidos através da aplicação dos operadores  $J_{\pm}$  na Eq. A.4 ficam devidamente normalizados pondo

$$J_{\pm} | J, M \rangle = \hbar [J(J+1) - M(M \pm 1)]^{1/2} | J, M \pm 1 \rangle.$$

Por outro lado, são gerados dessa forma  $2J + 1$  autovetores distintos para um dado valor de  $J$ . Como esse número de estados é necessariamente inteiro, segue que  $2J$  é também necessariamente inteiro, e que portanto  $J$  deve ser *inteiro ou semi-inteiro*.

**Soma de dois momentos angulares.** Sistema formado de dois subsistemas aos quais estão associados momentos angulares  $\vec{J}^{(1)}$  e  $\vec{J}^{(2)}$  respectivamente. Por se referirem a subsistemas diferentes esses dois operadores (ou a rigor, quaisquer componentes de cada um desses dois operadores) comutam:

$$[J_j^{(1)}, J_k^{(2)}] = 0.$$

O momento angular total do sistema formado pelos dois subsistemas é  $\vec{J} = \vec{J}^{(1)} + \vec{J}^{(2)}$ . É imediato verificar que  $\vec{J}$  é um momento angular, no sentido de que satisfaz às relações de comutação da Eq. A.1. Além disso,

$$[\vec{J}^2, \vec{J}^{(n)2}] = 0, \quad n = 1, 2$$

mas

$$[\vec{J}^2, J_j^{(n)}] \neq 0, \quad n = 1, 2; \quad i = 1, 2, 3.$$

Isso significa que é possível diagonalizar simultaneamente  $\vec{J}^{(1)2}$ ,  $\vec{J}^{(2)2}$ ,  $\vec{J}^2$  e  $J_3$ , mas *não é possível* diagonalizar qualquer das componentes de  $\vec{J}^{(1)}$  ou de  $\vec{J}^{(2)}$  simultaneamente com  $\vec{J}^2$ . Dessa forma é possível e conveniente considerar duas representações diferentes cada uma das quais é caracterizada por um conjunto de quatro operadores que comutam entre si e que são escolhidos para serem simultaneamente diagonais:

- a)  $\vec{J}^{(1)2}$ ,  $\vec{J}^{(2)2}$ ,  $\vec{J}^2$  e  $J_3$ ;
- b)  $\vec{J}^{(1)2}$ ,  $J_3^{(1)}$ ,  $\vec{J}^{(2)2}$  e  $J_3^{(1)}$ .

Os autovetores simultâneos de cada um desses conjuntos de operadores são representados respectivamente por

- a)  $| J_1, J_2, J, M \rangle$ ;
- b)  $| J_1, M_1, J_2, M_2 \rangle$ .

Cada um desses conjuntos é completo e ortonormal. Eles são portanto relacionados através de uma transformação unitária:

$$| J_1, M_1, J_2, M_2 \rangle = \sum_M | J_1, J_2, J, M \rangle \langle J_1, J_2, J, M | J_1, M_1, J_2, M_2 \rangle; \quad (\text{A.5})$$

$$|J_1, J_2, J, M\rangle = \sum_{M_1, M_2} |J_1, M_1, J_2, M_2\rangle \langle J_1, M_1, J_2, M_2 | J_1, J_2, J, M\rangle. \quad (\text{A.6})$$

Em geral  $\langle J_1, J_2, J, M | J_1, M_1, J_2, M_2\rangle = \langle J_1, M_1, J_2, M_2 | J_1, J_2, J, M\rangle^*$ . No entanto é possível e usual escolher as fases dos estados a) e b) acima de forma que esses elementos de matriz sejam reais (isto é, a transformação unitária é na realidade ortogonal). Nesse caso as duas transformações, Eq. A.5 e Eq. A.6, envolvem na realidade os mesmos elementos de matriz. Estes são chamados Coeficientes de Clebsch-Gordan e vêm muitas vezes disfarçados sob várias notações e/ou redefinições:

$$\begin{aligned} \langle J_1, J_2, J, M | J_1, M_1, J_2, M_2\rangle &= C_{M_1 M_2 M}^{J_1 J_2 J} = W_{(M_1 M_2 M)}^{(J_1 J_2 J)} \\ &= \frac{(-1)^{J_1 - J_2 - M}}{(2J + 1)^{1/2}} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J \\ M_1 & M_2 & -M \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

O símbolo que aparece na última redefinição é chamado símbolo 3-j e é conveniente por explicitar as relações de simetria existentes entre os coeficientes de Clebsch-Gordan: esses símbolos não se alteram sob qualquer permutação par de suas tres colunas, e são multiplicados por  $(-1)^{J_1 + J_2 + J}$  sob permutações ímpares. Os valores possíveis de  $J$  para valores dados de  $J_1$  e  $J_2$  são  $|J_1 - J_2| \leq J \leq J_1 + J_2$ . Isso pode ser verificado explicitamente contando o número de estados na representação  $M_1, M_2$  e usando  $M = M_1 + M_2$  (que resulta de  $J_3 = J_3^{(1)} + J_3^{(2)}$ ) para contar o número de estados na representação  $J, M$ .

Da definição básica dos Clebsches como produtos escalares de pares de estados em representações não compatíveis, segue que eles têm a interpretação quântica usual em termos de amplitudes de probabilidade.

### A.1.2 Matrizes de Rotação

De forma análoga ao que acontece na mecânica clássica, o momento angular  $\vec{J}$  funciona como gerador de transformações unitárias (na M.C. gerador de transformações canônicas infinitesimais) que correspondem a rotações. (Esse fato pode ser usado como uma forma de *definir* o momento angular de uma forma geral na Mecânica Quântica). Dessa forma o operador de rotação de um ângulo  $\phi$  em torno do eixo  $\vec{u}$  (vetor unitário) é

$$R_{\vec{u}}(\phi) = \exp -\frac{i}{\hbar} \phi \vec{u} \cdot \vec{J}. \quad (\text{A.8})$$

Isso quer dizer que, dado um estado qualquer  $|e\rangle$ , então o estado  $R_{\vec{u}}(\phi)|e\rangle$  descreve uma situação igual a menos de uma rotação de um ângulo  $\phi$  em torno de  $\vec{u}$ . A transformação correspondente

de operadores (variáveis dinâmicas) associadas ao sistema se obtém da definição usual de que o operador transformado atuando sobre o estado transformado reproduz o transformado do resultado da ação do operador sobre o estado original. Isso dá

$$O \rightarrow R_{\vec{u}}(\phi) O R_{\vec{u}}^{-1}(\phi). \quad (\text{A.9})$$

Uma rotação geral no espaço pode sempre ser decomposta em tres rotações sucessivas de tres ângulos apropriados (ângulos de Euler) em torno de tres eixos também apropriados (usualmente 3, 2' (novo eixo 2) e 3'' (novo-novo eixo 3) respectivamente). Chamando os ângulos de Euler  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_{3''}(\gamma) R_{2'}(\beta) R_3(\alpha). \quad (\text{A.10})$$

Essa representação tem o inconveniente de se referir explicitamente a eixos não tão obviamente identificáveis, mas é possível reduzi-la a uma outra que envolve apenas os eixos 1, 2, e 3 originais usando a Eq. A.9. De fato, usando essa relação

$$R_{2'}(\beta) = R_3(\alpha) R_2(\beta) R_3^{-1}(\alpha)$$

e de forma análoga é possível reduzir a rotação  $\gamma$  ao eixo 3 original com duas transformações sucessivas. Juntando todos esses resultados se obtém

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= R_3(\alpha) R_2(\beta) R_3(\gamma) \\ &= \exp -\frac{i}{\hbar} \alpha J_3 \exp -\frac{i}{\hbar} \beta J_2 \exp -\frac{i}{\hbar} \gamma J_3. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Os operadores de rotação Eq. A.11 admitem representações matriciais importantes (por sua função e frequência de uso) em bases formadas por autovetores simultâneos de  $\vec{J}^2$  e  $J_3$ . Como  $\vec{J}^2$  comuta com as tres componentes de  $\vec{J}$ , comuta também com todos os operadores de rotação, de modo que estes são *diagonais em J*. No entanto, como  $J_2$  não é diagonal nessa representação, os operadores de rotação não são em geral diagonais em  $M$ . Nessas bases de autovetores simultâneos de  $\vec{J}^2$  e  $J_3$ , portanto, os operadores de rotação aparecem em geral como matrizes que se quebram em blocos de dimensão  $2J + 1 \times 2J + 1$  ao longo da diagonal principal, correspondendo aos  $2J + 1$  autovetores de  $J_3$  correspondentes ao valor considerado de  $J$ . Esses blocos são pois matrizes que representam o efeito de rotações sobre tais conjuntos de vetores. Eles são as chamadas *representações irredutíveis* (de dimensão  $2J + 1$ ) do grupo das rotações, e usualmente representadas com a notação  $D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma)$ :

$$D_{MM'}^J(\alpha, \beta, \gamma) = \langle JM | R(\alpha, \beta, \gamma) | JM' \rangle = d_{MM'}^J(\beta) \exp -i(\gamma M' + \alpha M) \quad (\text{A.12})$$

onde

$$d_{MM'}^J(\beta) = \langle JM | \exp -\frac{i}{\hbar}\beta J_2 | JM' \rangle.$$

O efeito de uma rotação geral sobre um autovetor simultâneo de  $\vec{J}^2$  e  $J_3$  é imediatamente expresso em termos das matrizes  $D$ :

$$R(\alpha, \beta, \gamma) | JM \rangle = \sum_{M'} | JM' \rangle \langle JM' | R(\alpha, \beta, \gamma) | JM \rangle = \sum_{M'} | JM' \rangle D_{M'M}^J(\alpha, \beta, \gamma). \quad (\text{A.13})$$

Esta última expressão dá a expansão do estado rodado em termos dos estados  $|JM'\rangle$  originais. Os elementos da matriz  $D_{M'M}^J$  aparecem como coeficientes nessa expansão.

**Operadores tensoriais irredutíveis.** Os vetores de estado  $|JM'\rangle$  na Eq. A.13 acima constituem de fato a *base* para a definição da representação irredutível  $D_{M'M}^J$  do grupo das rotações, e a forma dessa equação é na realidade uma consequência imediata disso. Existe, por outro lado, uma classe importante de *operadores* que é caracterizada (definida) por ter propriedades de transformação sob rotações análogas à Eq. A.13. Os operadores pertencentes a essa classe são conhecidos como operadores tensoriais irredutíveis. Um *operador tensorial irredutível* de ordem  $k$  é na realidade um conjunto de  $2k + 1$  operadores  $T_q^k$ ,  $-k \leq q \leq k$  cujas propriedades de transformação sob rotações são dadas por

$$R(\alpha, \beta, \gamma) T_q^k R^{-1}(\alpha, \beta, \gamma) = \sum_{q'} T_{q'}^k D_{q'q}^k(\alpha, \beta, \gamma). \quad (\text{A.14})$$

Um exemplo simples de um operador tensorial irredutível de ordem 1 é o operador vetorial de multiplicação  $\vec{r}$ . Isso pode ser visto escrevendo  $\vec{r}$  em termos das componentes (complexas!)

$$\begin{aligned} r_0^1 &= x_3 = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10}(\theta, \varphi) \\ r_{\pm 1}^1 &= \mp \frac{x_1 \pm ix_2}{\sqrt{2}} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1\pm 1}(\theta, \varphi) \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

onde os  $Y_{lm}$  são harmônicas esféricas usuais. Como essas funções são também autofunções do momento angular orbital, e se transformam portanto sob rotações de acordo com a Eq. A.13, é claro que as componentes  $r_q^1$  (chamadas geralmente “componentes esféricas” de  $\vec{r}$ ) satisfazem à Eq. A.14. Esse resultado pode ainda ser estendido a qualquer operador vetorial. Por exemplo, o momento angular  $\vec{J}$  é um operador tensorial irredutível de ordem 1. Suas componentes esféricas são

$$\begin{aligned}
J_0^1 &= J_3 \\
J_{\pm 1}^1 &= \mp \frac{J_1 \pm iJ_2}{\sqrt{2}} = \mp J_{\pm} / \sqrt{2}.
\end{aligned}$$

**Teorema de Wigner-Eckart.** Uma propriedade extremamente importante dos elementos de matriz de operadores tensoriais irredutíveis entre vetores de estado que são autovetores simultâneos de  $\vec{J}^2$  e de  $J_3$  é o fato de eles poderem ser expressos como

$$\langle \nu' J' M' | T_q^k | \nu J M \rangle = (-1)^{2k} \frac{C_{MqM'}^{JkJ'}}{(2J+1)^{1/2}} \langle \nu' J' || T^k || \nu J \rangle \quad (\text{A.16})$$

onde o símbolo  $C$  é um coeficiente de Clebsh-Gordan e o elemento de matriz com barras duplas (chamado elemento de matriz reduzido) é *independente de  $M$ ,  $q$  e  $M'$* . Isso significa que a dependência do elemento de matriz com esses números quânticos é dada através do coeficiente de Clebsh-Gordan *apenas*, o que constitui o conteúdo essencial do Teorema de Wigner-Eckart. Na Eq. A.16  $\nu$  e  $\nu'$  representam outros eventuais números quânticos usados para identificação dos estados envolvidos no elemento de matriz considerado. Vale a pena notar que a forma de calcular o elemento reduzido de matriz consiste em calcular inicialmente o elemento de matriz completo (lado esquerdo da Eq. A.16) e em seguida dividir o resultado pelos coeficientes numéricos que multiplicam o elemento de matriz reduzido no lado direito da equação. O Teorema de Wigner-Eckart afirma que o que se obtém desse modo é uma quantidade que *não depende* dos particulares valores de  $M$ ,  $q$  e  $M'$  envolvidos no cálculo inicial. É claro que para que o procedimento seja bem sucedido é preciso que os valores adotados nesse cálculo para  $M$ ,  $q$  e  $M'$  não anulem o correspondente coeficiente de Clebsh-Gordan. Caso esse coeficiente seja nulo para os valores escolhidos, o resultado do cálculo do lado esquerdo da Eq. A.16 também será nulo. Uma prova simples do Teorema de Wigner-Eckart pode ser encontrada em A. Fetter e J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill Book Co. (1971), Appendix B.

## A.2 Descrição de sistemas de muitos férmions por meio de campos quantizados

O espaço de Hilbert que funciona na mecânica quântica como espaço de fases para um sistema de  $N$  partículas idênticas pode sempre ser realizado como produto dos  $N$  espaços de uma partícula correspondentes a cada uma das constituintes. Dessa forma, o número de partículas  $N$  entra na formulação como um ingrediente cinemático “a priori” associado ao sistema a ser estudado.

Em muitas situações (por exemplo, situações em que podem ocorrer a criação e a aniquilação de partículas, *mas também para simplificar determinados aspectos do tratamento dinâmico em situações nas quais isso de fato não ocorre*, como será visto no desenvolvimento do curso) é necessário ou pelo menos conveniente utilizar um tipo alternativo de tratamento em termos de “campos quantizados” no qual o número de partículas aparece não dessa forma, mas como uma variável dinâmica.

No caso específico de fermions idênticos (com spin  $1/2$  para fixar as idéias; a extensão para outros casos será trivial), os campos quantizados relevantes são um conjunto infinito (de fato, contínuo) de operadores  $\psi_s(\vec{r})$  onde o rótulo  $s$  se refere ao estado do spin (e.g.  $s = \pm 1/2$  correspondendo a uma direção 3 dada) e  $\vec{r}$  se refere a uma posição no espaço (e que não deve ser confundido com a variável dinâmica  $\vec{r}$ , associada à posição de uma partícula). Esse conjunto continuamente infinito consiste portanto neste caso de um par de operadores ( $s = \pm 1/2$ ) associado a *cada ponto de espaço*. Os operadores  $\psi_s(\vec{r})$  agem sobre vetores de um espaço de Hilbert, cujos elementos vão ser designados genericamente como “kets”  $|\rangle$ , como operadores lineares mas *não hermiteanos*, isto é  $\psi_s(\vec{r}) \neq \psi_s^\dagger(\vec{r})$ . Eles são (no caso de fermions) caracterizados ainda pelas relações de *anticomutação*

$$\begin{aligned} \{\psi_s(\vec{r}), \psi_{s'}^\dagger(\vec{r}')\} &= \delta_{ss'} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \\ \{\psi_s(\vec{r}), \psi_{s'}(\vec{r}')\} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

onde o símbolo  $\{a, b\}$  indica o *anticomutador* de  $a$  e  $b$ ,  $ab + ba$ . Afim de evitar questões técnicas ligadas à natureza singular da Eq. A.17 (funções delta) é conveniente expandir a dependência de  $\vec{r}$  dos operadores  $\psi_s(\vec{r})$  em termos de um conjunto ortonormal e completo de funções  $u_\lambda(\vec{r})$ :

$$\begin{aligned} \int d\vec{r} u_\lambda^*(\vec{r}) u_{\lambda'}(\vec{r}) &= \delta_{\lambda\lambda'} \\ \sum_\lambda u_\lambda^*(\vec{r}) u_\lambda(\vec{r}') &= \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \end{aligned}$$

Então

$$\psi_s(\vec{r}) = \sum_\lambda u_\lambda(\vec{r}) a_{\lambda s}$$

sendo que os coeficientes (operadores!)  $a_{\lambda s}$  podem também ser expressos em termos dos  $\psi_s(\vec{r})$  como

$$a_{\lambda s} = \int d\vec{r} u_\lambda^*(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}). \quad (\text{A.18})$$

As relações de anticomutação Eq. A.17 juntamente com as relações de ortonormalidade e completeza das funções  $u_\lambda(\vec{r})$  dão para os  $a_{\lambda s}$

$$\begin{aligned}\{a_{\lambda s}, a_{\lambda' s'}^\dagger\} &= \delta_{\lambda\lambda'}\delta_{ss'} \\ \{a_{\lambda s}, a_{\lambda' s'}\} &= 0.\end{aligned}\tag{A.19}$$

Um operador hermiteano importante que se constroi com os operadores de campo é

$$N = \int d\vec{r} \sum_s \psi_s^\dagger(\vec{r})\psi_s(\vec{r}) = \sum_{\lambda s} a_{\lambda s}^\dagger a_{\lambda s} \equiv \sum_{\lambda s} n_{\lambda s}.$$

O espectro desse operador pode ser obtido facilmente a partir das relações de anticomutação para os operadores de campo. De fato, usando as Eqs. A.19 é imediato verificar que

a)  $[n_{\lambda s}, n_{\lambda' s'}] = 0$ , isto é,  $N$  é escrito como uma soma de operadores hermiteanos que *comutam* entre si e que portanto podem ser todos diagonalizados simultaneamente.

b)  $n_{\lambda s}^2 = a_{\lambda s}^\dagger a_{\lambda s} a_{\lambda s}^\dagger a_{\lambda s} = a_{\lambda s}^\dagger a_{\lambda s} = n_{\lambda s}$ , isto é, os operadores hermiteanos  $n_{\lambda s}$  são idempotentes e são portanto operadores de projeção, com autovalores 1 e 0.

c)  $[n_{\lambda s}, a_{\lambda s}] = -a_{\lambda s}$  e  $[n_{\lambda s}, a_{\lambda s}^\dagger] = a_{\lambda s}^\dagger$ . Dessas relações decorre que  $a_{\lambda s}^\dagger|0_{\lambda s}\rangle = |1_{\lambda s}\rangle$  e  $a_{\lambda s}|1_{\lambda s}\rangle = |0_{\lambda s}\rangle$  onde  $|0_{\lambda s}\rangle$  e  $|1_{\lambda s}\rangle$  são autovetores de  $n_{\lambda s}$  com autovalores 0 e 1 respectivamente. Isso mostra que os operadores  $a_{\lambda s}^\dagger$  e  $a_{\lambda s}$  funcionam como operadores de levantamento e de abaixamento para autovetores de  $n_{\lambda s}$ . A existência de autovalores 0 e 1 apenas decorre da natureza positiva definida da norma e do fato de que  $a_{\lambda s}^{\dagger 2}|0_{\lambda s}\rangle = 0$  (vetor de norma nula) devido à *anticomutatividade* dos operadores de levantamento  $a_{\lambda s}^\dagger$ .

Como conseqüência desses fatos e da definição de  $N$  como soma dos  $n_{\lambda s}$ , o espectro de  $N$  consiste dos inteiros 0, 1, 2, .... Esse operador é interpretado como associado ao *número de fermions no sistema*. Isso na realidade torna essa quantidade uma variável dinâmica associada a um operador no espaço dos kets sobre os quais atuam os operadores de campo, conforme anunciado. O autovetor de  $N$  com autovalor 0,  $|0\rangle$ , é o autovetor simultâneo de todos os  $n_{\lambda s}$  com autovalor zero, o que de acordo com a interpretação de  $N$  corresponde ao “vácuo”, isto é, ao estado sem nenhum fermion. Autovetores com autovalor  $n > 0$  são obtidos agindo sobre  $|0\rangle$  com  $n$  operadores de levantamento *diferentes*, já que o produto de dois operadores iguais é nulo devido à propriedade de anticomutatividade. Os operadores de levantamento  $a_{\lambda s}^\dagger$  são portanto operadores de criação, e os operadores de abaixamento são operadores de aniquilação de fermions.

Para completar a interpretação desse esquema é preciso ainda explicitar a natureza dos estados quânticos de muitos fermions que são obtidos aplicando sucessivamente vários operadores de criação sobre o vácuo. Isso pode ser feito interpretando o operador  $\psi_s^\dagger(\vec{r})$  como operador de criação de um fermion com projeção de spin  $s$  *no ponto*  $\vec{r}$ , isto é

$$\psi_s^\dagger(\vec{r})|0\rangle = |\vec{r}s\rangle.$$

Consistentemente com isso,  $a_{\lambda s}^\dagger$  cria um fermion com spin  $s$  no estado cuja função de onda (amplitude de probabilidade) é  $u_\lambda(\vec{r})$  (cf. Eq. A.18):

$$|\lambda s\rangle = a_{\lambda s}^\dagger|0\rangle.$$

A consistência dessas interpretações pode ser verificada explicitamente calculando a função de onda

$$\langle\vec{r}s|\lambda s'\rangle = \langle 0|\psi_s(\vec{r})a_{\lambda s'}^\dagger|0\rangle = u_\lambda(\vec{r})\delta_{ss'}$$

onde o último passo resulta do uso da Eq. A.18 e das relações de anticomutação Eq. A.17:

$$\begin{aligned} \langle 0|\psi_s(\vec{r})a_{\lambda s'}^\dagger|0\rangle &= \int d\vec{r}'\langle 0|\psi_s(\vec{r})\psi_s'^\dagger(\vec{r}')|0\rangle u_\lambda(\vec{r}') \\ &= \int d\vec{r}'\langle 0|\{\psi_s(\vec{r}), \psi_s'^\dagger(\vec{r}')\} - \psi_s'^\dagger(\vec{r}')\psi_s(\vec{r})|0\rangle u_\lambda(\vec{r}') \\ &= \int d\vec{r}'\delta(\vec{r} - \vec{r}')\delta_{ss'}u_\lambda(\vec{r}'). \end{aligned}$$

Nesse cálculo foi usado ainda o resultado  $\psi_s(\vec{r})|0\rangle = 0$ . Esse resultado pode ser deduzido de que  $|0\rangle$  é o autovetor comum de todos os  $n_{\lambda s}$  com autovalor zero, isto é

$$\langle 0|a_{\lambda s}^\dagger a_{\lambda s}|0\rangle = 0$$

para todo  $\lambda s$ ; desse modo  $a_{\lambda s}|0\rangle$  é o vetor nulo também para todo  $\lambda s$  e o mesmo acontece para  $\psi_s(\vec{r})|0\rangle = 0$ . Isso significa que qualquer operador de aniquilação dá um resultado nulo quando agindo sobre o vácuo.

Um cálculo do mesmo tipo (embora um pouco mais extenso) revela a natureza de estados com dois fermions:

$$\langle 0|\psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_{s_2}(\vec{r}_2)a_{\lambda_2 s'}^\dagger a_{\lambda_1 s}^\dagger|0\rangle = \int d\vec{r}_1' \int d\vec{r}_2' \langle 0|\psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_{s_2}(\vec{r}_2)\psi_{s'}^\dagger(\vec{r}_2')\psi_s^\dagger(\vec{r}_1')|0\rangle u_{\lambda_2}(\vec{r}_2')u_{\lambda_1}(\vec{r}_1') \quad (\text{A.20})$$

onde aparece no integrando um valor esperado no vácuo de quatro operadores de campo. Como no primeiro caso acima, esse objeto pode ser calculado usando as regras de anticomutação para levar os operadores de aniquilação a agirem sobre o vácuo, o que dá um resultado nulo. As

contribuições não nulas provém portanto das funções delta dos anticomutadores, que podem ser integradas imediatamente. Seguem alguns passos desse cálculo:

$$\begin{aligned}\psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_{s_2}(\vec{r}_2)\psi_{s'}^\dagger(\vec{r}_2)\psi_s^\dagger(\vec{r}_1) &= \psi_{s_1}(\vec{r}_1)\{\psi_{s_2}(\vec{r}_2)\psi_{s'}^\dagger(\vec{r}_2)\}\psi_s^\dagger(\vec{r}_1) - \psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_{s'}^\dagger(\vec{r}_2)\psi_{s_2}(\vec{r}_2)\psi_s^\dagger(\vec{r}_1) \\ &= \psi_{s_1}(\vec{r}_1)\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_2')\delta_{s_2s'}\psi_s^\dagger(\vec{r}_1) - \psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_{s'}^\dagger(\vec{r}_2)\psi_{s_2}(\vec{r}_2)\psi_s^\dagger(\vec{r}_1); \quad (\text{A.21})\end{aligned}$$

o primeiro termo da última linha pode ser reescrito como

$$\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_2')\delta_{s_2s'}\psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_s^\dagger(\vec{r}_1) = \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_2')\delta_{s_2s'}\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_1')\delta_{s_1s} - \delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_2')\delta_{s_2s'}\psi_s^\dagger(\vec{r}_1)\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_2')$$

sendo que a contribuição deste último termo é nula, pois ele contém um operador de aniquilação à direita, que vai agir diretamente sobre o vácuo. O último termo da Eq. A.20 pode ser tratado da mesma forma, dando uma contribuição

$$-\delta(\vec{r}_1 - \vec{r}_2')\delta_{s_1s'}\delta(\vec{r}_2 - \vec{r}_1')\delta_{s_2s}$$

mais termos nulos, com operadores de aniquilação agindo sobre o vácuo. Levando os termos não nulos (produtos de funções delta) à Eq. A.20 resulta finalmente

$$\langle 0|\psi_{s_1}(\vec{r}_1)\psi_{s_2}(\vec{r}_2)a_{\lambda_2s'}^\dagger a_{\lambda_1s}^\dagger|0\rangle = u_{\lambda_2}(\vec{r}_2)u_{\lambda_1}(\vec{r}_1)\delta_{s_2s'}\delta_{s_1s} - u_{\lambda_2}(\vec{r}_1)u_{\lambda_1}(\vec{r}_2)\delta_{s_2s}\delta_{s_1s'}$$

Esse resultado mostra explicitamente que a expressão escrita na Eq. A.20 é a função de onda *antissimetrizada* de duas partículas nos estados descritos pelas funções de onda de uma partícula  $u_{\lambda_1}$  e  $u_{\lambda_2}$ . Da mesma forma é possível verificar que

$$\langle 0|\psi_{s_1}(\vec{r}_1)\dots\psi_{s_n}(\vec{r}_n)a_{\lambda_n s(n)}^\dagger\dots a_{\lambda_1 s'}^\dagger|0\rangle$$

é a função de onda *antissimetrizada* de  $n$  partículas nos estados  $u_{\lambda_1}\dots u_{\lambda_n}$ . O vetor de estado  $a_{\lambda_n s(n)}^\dagger\dots a_{\lambda_1 s'}^\dagger|0\rangle$  representa portanto um estado *antissimetrizado* de  $n$  partículas ocupando os estados de uma partícula  $u_{\lambda_n}\chi_{s(n)}\dots u_{\lambda_1}\chi_s$ . É fácil verificar tamb'ém que esse vetor de estado está devidamente normalizado, isto é

$$\langle 0|a_{\lambda_1 s'}\dots a_{\lambda_n s(n)}^\dagger a_{\lambda_n s(n)}^\dagger\dots a_{\lambda_1 s'}^\dagger|0\rangle = 1.$$

O uso dos operadores de campo permite então escrever de forma simples e compacta vetores de estado com um número qualquer de partículas levando em conta automaticamente a antissimetrização exigida pela estatística de Fermi através das relações de anticomutação, Eqs. A.17 e A.19. De fato, os estados de  $n$  fermions construídos criando partículas no vácuo através

dos operadores  $a_{\lambda_s}^\dagger$  correspondem (como verificado explicitamente) a determinantes de Slater escritos em termos da base de uma partícula  $u_\lambda(\vec{r})\chi_s$  e constituem portanto uma base para a representação de um estado *geral* de  $n$  fermions. Este pode sempre ser expresso como uma combinação linear de determinantes de Slater e portanto também dos estados  $a_{\lambda_n s(n)}^\dagger \dots a_{\lambda_1 s'}^\dagger |0\rangle$ .

Isso mostra como é possível utilizar os operadores de campo para representar os *estados* (devidamente antissimetrizados) de um sistema de muitos fermions idênticos. Para completar o esquema é preciso ainda obter a forma da representação das *variáveis dinâmicas* também em termos dos operadores de campo. A condição que define essa forma é a de que os elementos de matriz calculados com as variáveis dinâmicas e com os estados representados em termos dos operadores de campo devem ser iguais aos calculados usando a forma usual das variáveis dinâmicas e dos estados de muitos fermions correspondentes. Como estados do tipo  $a_{\lambda_n s(n)}^\dagger \dots a_{\lambda_1 s'}^\dagger |0\rangle$  e determinantes de Slater são bases nas quais é possível escrever estados gerais, basta verificar a equivalência para elementos de matriz envolvendo estados desse tipo.

É comum classificar as variáveis dinâmicas de sistemas de muitas partículas idênticas em operadores de um corpo, de dois corpos, etc. A identidade das partículas exige que esses operadores sejam sempre *simétricos* em todas as partículas. Um operador de um corpo típico é a energia cinética

$$K = \sum_{i=1}^n \frac{p_i^2}{2m} = \sum_{i=1}^n K_i \quad (\text{A.22})$$

que satisfaz obviamente a essa condição de simetria. O que caracteriza um operador de um corpo é o fato de ele ser escrito como uma soma de termos cada um dos quais se refere a apenas uma partícula. Um operador de dois corpos se escreve, de maneira análoga, como uma soma de termos cada um dos quais se refere a duas partículas. Um exemplo típico de um tal operador resulta de um potencial agindo entre pares de partículas:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n v(i,j) \quad (\text{A.23})$$

onde os argumentos  $i, j$  de  $v$  indicam as variáveis apropriadas das duas partículas (posição, spin, etc.),  $v(i,j) = v(j,i)$  e o fator  $1/2$  evita contagem dupla, dado que ambos os índices variam de 1 a  $n$ . Nesta forma usual, o número  $n$  de partículas aparece explicitamente na forma dessas variáveis dinâmicas.

As expressões em termos dos operadores de campo que representam esses operadores, satisfazendo a condição exigida, são respectivamente

$$K = \sum_{\lambda_1 s_1 \lambda_2 s_2} \langle \lambda_2 s_2 | K | \lambda_1 s_1 \rangle a_{\lambda_2 s_2}^\dagger a_{\lambda_1 s_1} \quad (\text{A.24})$$

e

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 s_1 \lambda_2 s_2 \lambda_3 s_3 \lambda_4 s_4} \langle \lambda_3 s_3 \lambda_4 s_4 | v | \lambda_1 s_1 \lambda_2 s_2 \rangle a_{\lambda_3 s_3}^\dagger a_{\lambda_4 s_4}^\dagger a_{\lambda_2 s_2} a_{\lambda_1 s_1} \quad (\text{A.25})$$

onde  $\langle \lambda_2 s_2 | K | \lambda_1 s_1 \rangle$  é um elemento de matriz *usual* do operador de uma partícula (energia cinética, no caso) calculado com as funções de onda  $u_{\lambda_2} \chi_{s_2}$  e  $u_{\lambda_1} \chi_{s_1}$ ; e  $\langle \lambda_3 s_3 \lambda_4 s_4 | v | \lambda_1 s_1 \lambda_2 s_2 \rangle$  é o elemento de matriz usual do potencial de dois corpos  $v$  calculado com as funções de onda indicadas. A verificação de que as Eqs. A.24 e A.25 efetivamente satisfazem a condição de reproduzirem, com os estados correspondentes expressos em termos de operadores de criação, os elementos de matriz usuais calculados com as Eqs. A.22 e A.23 é um exercício longo mas sem dificuldade do uso das regras de anticomutação dos operadores de campo.

Uma propriedade importante (e facilmente verificável) de operadores como  $K$  e  $V$  acima é que eles comutam com o operador número de fermions  $N$ , isto é  $[K, N] = 0$  e  $[V, N] = 0$ . Portanto uma hamiltoniana de muitos corpos que contém energia cinética e interações de dois corpos descritas por um potencial,  $H = K + V$ , também comuta com  $N$ ,  $[H, N] = 0$ . Esta última relação significa que para tais sistemas *o número de partículas é uma constante do movimento*, isto é, uma quantidade conservada.