

V 1321800 3997

IPT - T-03/79

DEISE AMARO AGRELLO

ESTUDO SOBRE O ^{16}O NO MODELO DE PARTÍCULA ALFA
USANDO FORÇAS DE TRÊS CORPOS

INIS Input

MF prepared

TESE DE MESTRADO
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA
SÃO PAULO - 1979

IPT T 03/79

DEISE AMARO AGRELLO

ESTUDO SOBRE O 1° NO MODELO DE PARTÍCULA ALFA
USANDO FORÇAS DE TRÊS CORPOS

TESE DE MESTRADO
INSTITUTO DE FÍSICA TEÓRICA
SÃO PAULO - 1979

*Dedico aos meus pais
Joel e Carminha, aos irmãos
Cilinha e Paulo e à querida
vó Laura.*

AGRADECIMENTOS

- Ao professor e amigo Valdir Casaca Aguilera-Navarro pela orientação e assistência durante todo o decorrer deste trabalho.
- Ao professor Paulo Leal Ferreira pela acolhida no Instituto de Física Teórica.
- Ao colega José Noboru Maki pelas valiosas discussões.
- Ao professor O. Portilho e todos os professores do I.F.T. pelo estímulo e pelas valiosas discussões.
- Aos colegas e funcionários do I.F.T. pela camaradagem.
- À todas as pessoas amigas que me ajudaram de uma forma ou de outra durante este período.
- Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pelo suporte financeiro.

ÍNDICE

1. Introdução.....	1
2. Generalidades.....	4
- Estados de osciladores harmônicos	
- Sistemas de coordenadas	
3. Função de onda para o ^{16}O	8
4. Elementos de matriz do hamiltoniano intrínseco.....	23
5. Resultados e conclusões.....	38
6. Apêndice:	
Coeficientes de Moshinsky usuais e generalizados.....	53
7. Referências.....	56

1. Introdução

Faremos um estudo do estado fundamental do ^{16}O , usando um modelo de partícula α , ou seja, estudaremos este núcleo como sendo composto de quatro partículas alfas, todas sem estrutura interna, interagindo através de forças de dois e três corpos. Para tanto, faremos uma análise variacional do hamiltoniano usando como função de ensaio uma combinação linear de osciladores harmônicos de quatro partículas. Estudaremos algumas propriedades nucleares do ^{16}O , tais como energia de ligação e "gaps".

O modelo de partículas alfas é bastante antigo. Foi introduzido em 1928 ⁽¹⁾, e tem sido razoavelmente bem sucedido na descrição de algumas propriedades nucleares, especialmente dos núcleos leves. Desde aquela época, extensos cálculos foram feitos utilizando potenciais α - α de dois corpos. Alguns desses trabalhos estão relacionados nas referências ⁽²⁻⁷⁾. Nelas utiliza-se o modelo ou alguma pequena variante deste.

Alguns cálculos, comparando o modelo de partícula alfas com outros modelos, mostraram que é muito mais vantajoso trabalhar com este, pois os resultados são obtidos de uma maneira bastante simples ⁽⁸⁾.

Os estudos feitos anteriormente com o modelo, usando somente forças de dois corpos, indicaram, contudo, que essas forças são incapazes de descrever satisfatoriamente a energia de ligação, como no caso do estado fundamental do ^{16}O , por exemplo, apesar de descrever bem outras propriedades nucleares. Os valores obtidos não excedem à 40% do valor experimental da energia de ligação para núcleos leves, e alguns autores não encontraram sequer um sistema ligado.

O objetivo deste trabalho é, portanto, incluir forças de três corpos e examinar seus efeitos num sistema de quatro partículas.

O potencial α - α utilizado por nós foi construído por Ali e Bodmer⁽⁹⁾, e já foi bastante usado em cálculos anteriores, comprovando sua eficiência⁽¹⁰⁻¹³⁾. É um potencial α - α fenomenológico dependente do momento angular relativo.

Adicionamos a este potencial um potencial de três corpos simples. Este procedimento foi introduzido por Delves e Hennell⁽¹⁴⁾ e Zofka e Sotona⁽¹⁵⁾, que adicionaram uma força de três nucleons simples ao hamiltoniano do ^3H e ^4He , respectivamente.

Utilizamos neste trabalho, dois potenciais fenomenológicos do mesmo tipo, com parâmetros ajustados de maneira diferente. Foram sugeridos por Portilho e Coon⁽¹⁶⁾ e Ogasawara e Hiura⁽¹⁷⁾ no cálculo de propriedades nucleares do ^{12}C . Esses potenciais não afetam o ajuste do potencial de dois corpos de Ali-Bodmer e conservam a simplicidade dos cálculos feitos no modelo de partícula α . Espera-se, portanto, com a introdução do potencial 3- α melhorarmos resultados obtidos usando somente o potencial de dois corpos.

A proposta se ajusta perfeitamente ao esquema variacional proposto por Moshinsky⁽¹⁸⁾ que já foi bastante usado para sistemas de 3- α e 4- α ⁽¹⁰⁻¹²⁾. Este método consiste em se expandir a função de onda de ensaio (variacional) em uma base de funções de onda de osciladores harmônicos translacionalmente invariantes que são completamente simétricas e têm momento angular total e paridade bem definidos. No capítulo 3, construímos essa base, com ajuda dos coeficientes de Moshinsky, que são definidos e discutidos em apêndice.

No capítulo 4, calculamos os elementos de matriz do hamiltoniano intrínseco, eliminando facilmente as energias espúrias devidas ao movimento de centro de massa do sistema e utilizando os potenciais acima mencionados.

No capítulo 5, discutimos os resultados obtidos e apresentamos nossas conclusões.

2. Generalidades

Inicialmente recordaremos algumas definições e conceitos que serão úteis neste trabalho.

Estados de osciladores harmônicos

O estudo quântico do oscilador harmônico parte da solução da equação de autovalores

$$H'\Psi = [(p')^2/2m + m\omega^2/2(r')^2]\Psi = E\Psi, \quad (2.1)$$

onde m , \vec{r}' , \vec{p}' são respectivamente massa, coordenada e momento linear de uma partícula em um potencial de oscilador harmônico caracterizado pela frequência ω . Quando fazemos \vec{r}' , \vec{p}' e H' adimensionais, ou seja,

$$\vec{r} = \sqrt{m\omega/\hbar} \vec{r}', \quad (2.2)$$

$$\vec{p} = 1/\sqrt{m\omega\hbar} \vec{p}', \quad (2.3)$$

$$H = 1/\hbar\omega H', \quad (2.4)$$

a equação (2.1) torna-se

$$1/2 (p^2 + r^2)\Psi = E\Psi. \quad (2.5)$$

A função de onda do oscilador harmônico, em várias notas aqui usadas, será então dada por

$$\Psi_{n\ell m} = \langle \vec{x} | n\ell m \rangle = | n \ell m \rangle = R_{n\ell}(r) Y_{\ell m}(\theta, \phi) \quad (2.6)$$

onde $Y_{\ell m}$ são harmônicos esféricos e $R_{n\ell}(r)$ são funções radiais dados por (19)

$$R_{n\ell}(r) = \left[\frac{2(n!)}{\Gamma(n+\ell+3/2)} \right]^{1/2} r^\ell \exp(-r^2/2) L_n^{\ell+1/2}(r^2), \quad (2.7)$$

onde $L_n^{\ell+1/2}$ são polinômios de Laguerre. A energia associada com

$$E_{n,\ell} = 2n + \ell + \frac{3}{2} \quad (2.8)$$

Para o caso de duas partículas, a função de onda com momento angular orbital total λ é obtida a partir do seguinte acoplamento

$$\begin{aligned} |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \lambda \mu\rangle &= \left[\psi_{n_1 \ell_1 m_1}(\vec{r}_1) \psi_{n_2 \ell_2 m_2}(\vec{r}_2) \right]_{\lambda \mu} = \\ &= \sum_{m_1 m_2} \langle \ell_1 \ell_2 m_1 m_2 | \lambda \mu \rangle R_{n_1 \ell_1}(r_1) Y_{\ell_1 m_1}(\theta_1, \phi_1) R_{n_2 \ell_2}(r_2) Y_{\ell_2 m_2}(\theta_2, \phi_2) \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde os coeficientes da expansão são coeficientes de Clebsch-Gordan e os parênteses quadrados indicam que estamos acoplando funções de duas partículas com momento angular orbital total λ e projeção μ . Os valores de λ são restritos pela regra de triangularidade para acoplamento de momentos angulares

$$|\ell_1 - \ell_2| \leq \lambda \leq \ell_1 + \ell_2 \quad (2.10)$$

Coordenadas relativas

Muitas vezes é conveniente definir sistemas de coordenadas relativas. Quando estudamos as funções de onda de quatro partículas para o ^{16}O , impomos que estas sejam translacionalmente invariantes, o que se obtém facilmente expressando-as em termos de coordenadas relativas. Será conveniente ainda, definir dois sistemas de coordenadas relativas distintos, cada um atendendo a um objetivo diferente, como veremos a seguir. Inicialmente introduzimos as coordenadas relativas de Jacobi, que para n vetores, são dadas por

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{X}_s &= [s(s+1)]^{-1/2} \left[\sum_{t=1}^s \vec{x}_t - s \vec{x}_{s+1} \right], \quad 1 \leq s \leq n-1 \\ \vec{X}_n &= \sqrt{1/n} \sum_{t=1}^n \vec{x}_t \end{aligned} \right. \quad (2.11)$$

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{X}_n &= \sqrt{1/n} \sum_{t=1}^n \vec{x}_t \end{aligned} \right. \quad (2.12)$$

Esta transformação é ortogonal e as coordenadas (2.11) são invariantes sob translação. A coordenada (2.12) é proporcional à coordenada de centro de massa.

Para o nosso problema específico, onde $n=4$ temos explicitamente,

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{X}_a &= \sqrt{1/2} (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \\ \vec{X}_b &= \sqrt{1/5} (\vec{x}_1 + \vec{x}_2 - 2\vec{x}_3) \\ \vec{X}_c &= \sqrt{1/12} (\vec{x}_1 + \vec{x}_2 + \vec{x}_3 - 3\vec{x}_4) \\ \vec{X}_d &= 1/2 (\vec{x}_1 + \vec{x}_2 + \vec{x}_3 + \vec{x}_4) \end{aligned} \right. \quad (2.13)$$

onde \vec{x}_i , $1 \leq i \leq n$, são as coordenadas de laboratório e \vec{X}_d é proporcional à coordenada de centro de massa. Este sistema de coordenadas relativas nos será útil, como veremos, no cálculo dos elementos de matriz do hamiltoniano.

O outro sistema de coordenadas que usaremos foi introduzido por Kramer e Moshinsky⁽²⁰⁾, a saber,

$$\left\{ \begin{aligned} \vec{Y}_1 &= 1/2 (\vec{x}_1 + \vec{x}_4 - \vec{x}_2 - \vec{x}_3) \\ \vec{Y}_2 &= 1/2 (\vec{x}_2 + \vec{x}_4 - \vec{x}_1 - \vec{x}_3) \\ \vec{Y}_3 &= 1/2 (\vec{x}_3 + \vec{x}_4 - \vec{x}_1 - \vec{x}_2) \\ \vec{Y}_4 &= 1/2 (\vec{x}_1 + \vec{x}_2 + \vec{x}_3 + \vec{x}_4) \end{aligned} \right. \quad (2.14)$$

onde \vec{Y}_4 é proporcional à coordenada de centro de massa. Este sistema nos será útil na simetriação da função de onda, pois, como

As coordenadas de Kramer-Moshinsky e as de Jacobi (2.13) estão relacionadas entre si pela transformação ortogonal

$$\begin{pmatrix} \vec{y}_1 \\ \vec{y}_2 \\ \vec{y}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1/2} & \sqrt{1/6} & -\sqrt{1/3} \\ -\sqrt{1/2} & \sqrt{1/6} & -\sqrt{1/3} \\ 0 & -\sqrt{2/3} & -\sqrt{1/3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_a \\ \vec{x}_b \\ \vec{x}_c \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Através dela podemos relacionar os estados nas coordenadas de Kramer-Moshinsky com os estados nas coordenadas de Jacobi, ou vice-versa, como veremos na seção seguinte.

3. Função de onda para o ^{16}O

Faremos uma análise variacional do hamiltoniano tomando como função de ensaio uma combinação linear de funções de osciladores harmônicos de quatro partículas, ou seja, vamos escrever a função de onda variacional como

$$\Psi = \sum_{\nu} a_{\nu} \phi_{\nu} \quad (3.1)$$

onde os coeficientes a_{ν} são os parâmetros variacionais, ν representa os números quânticos dos osciladores e ϕ_{ν} são funções de osciladores harmônicos de quatro partículas. A função de onda em (3.1) deve ter as seguintes características:

- Invariância translacional, eliminando assim as energias espúrias do movimento de centro de massa;
- Momento angular orbital total $\lambda=0$, uma vez que para o estado fundamental do ^{16}O , $J=S=0$;
- Completamente simétrica, uma vez que estamos estudando o ^{16}O como sendo formado de quatro partículas α , que são bósons, e de acordo com o princípio de Pauli, a função de onda para um sistema de n bósons deve ser completamente simétrica sob troca de coordenadas, spins e isospins;
- Paridade positiva, que é a paridade do estado fundamental do ^{16}O .

Para obter tais características, procedemos, por partes, como segue.

A fim de obter funções de onda translacionalmente invariantes, utilizamos sistemas de coordenadas relativas, em particular as coordenadas relativas de Jacobi, definidas em (2.13), para 4 partículas.

Os estados nas coordenadas de laboratório são convenientes quando calculamos os elementos de matriz de operadores de um corpo, como por exemplo, a energia cinética, porém, isto não acontece quando tratamos com operadores que dependem de coordenadas relativas. Na verdade, usar o sistema de coordenadas relativas (2.13) nos é conveniente pelo menos por três razões. Primeiramente, porque facilita o cálculo dos elementos de matriz de operadores de dois corpos, que são da forma

$$V_{ij} = V(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|),$$

que, como veremos podem ser escritos em termos da coordenada \vec{X}_a de (2.13). Facilita também o cálculo dos elementos de matriz de três corpos, que como veremos, podem ser escritos em termos das coordenadas \vec{X}_a e \vec{X}_b . Finalmente, facilita o cálculo do fator de forma, que pode ser escrito unicamente em termos da coordenada \vec{X}_c (32).

Para eliminar as contribuições espúrias devidas ao movimento de centro de massa, definiremos um hamiltoniano intrínseco e tomaremos zero quanto na coordenada de centro de massa, ou seja, faremos $N_d = 2 n_d + \ell_d = 0$, obtendo então funções de onda de quatro partículas nas três primeiras coordenadas de Jacobi em (2.13).

Para impor a característica de $\lambda=0$, que é o momento angular orbital total do estado fundamental do 1S_0 , acoplamos funções de onda dos osciladores harmônicos nas coordenadas \vec{X}_a , \vec{X}_b e \vec{X}_c de Jacobi da seguinte maneira,

$$|n_a \ell_a, n_b \ell_b (\Lambda); n_c \ell_c; \lambda \mu \rangle =$$

A construção (3.2) indica que acoplamos inicialmente funções de osciladores harmônicos com momentos $\vec{\ell}_a$ e $\vec{\ell}_b$ para obter um $\vec{\Lambda}$ intermediário e em seguida acoplamos a $\vec{\ell}_c$ para obter finalmente o momento angular total $\vec{\lambda}$ e projeção μ desejados. Para $\lambda=0$ temos que $\vec{\Lambda} = \vec{\ell}_c$.

Podemos também acoplar em outra ordem, isto é,

$$\begin{aligned} |n_a \ell_a; n_b \ell_b, n_c \ell_c (\Lambda'); \lambda \mu\rangle &= \\ &= [\langle \vec{\lambda}_a | n_a \ell_a \rangle [\langle \vec{\lambda}_b | n_b \ell_b \rangle \langle \vec{\lambda}_c | n_c \ell_c \rangle]^{\Lambda'}]_{\lambda \mu} \end{aligned} \quad (3.3)$$

onde acoplamos $\vec{\ell}_a$ com $\vec{\Lambda}' = \vec{\ell}_b + \vec{\ell}_c$ para obter $\vec{\lambda}$ total. Os estados (3.2) e (3.3) estão relacionados entre si através de⁽²¹⁾

$$\begin{aligned} |n_i \ell_i, n_j \ell_j (\Lambda); n_k \ell_k; \lambda \mu\rangle &= \sum_{\Lambda'} |n_i \ell_i; n_j \ell_j, n_k \ell_k (\Lambda'); \lambda \mu\rangle \times \\ &\times [(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)]^{1/2} W(\ell_i \ell_j \lambda \ell_k; \Lambda \Lambda') \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde W é um coeficiente de Racah.

Como já foi dito, a função de onda para um sistema de n bósons deve ser completamente simétrica sob troca de coordenadas, spins e isospins. Seja a função de onda definida como

$$|\Psi\rangle = |\phi\rangle |\chi\rangle \quad (3.5)$$

onde $|\phi\rangle$ descreve o sistema no espaço de configuração e $|\chi\rangle$ descreve o comportamento do sistema no espaço de spin-isospin. Teremos então uma função de onda completamente simétrica se fizermos $|\phi\rangle$ e $|\chi\rangle$ totalmente simétricas. Para obter tais funções aplicamos a técnica de operadores de projeção à funções arbitrárias fazendo com que $|\phi\rangle$ e $|\chi\rangle$ sejam caracterizada pela re-

Para obter $|\phi\rangle$ simétrica, para 4 partículas, deveríamos aplicar as 24 permutações do grupo simétrico $S(4)$, que divididas em 5 classes, são dadas por

1. e ;
2. (12), (13), (14), (23), (24), (34);
3. (12)(34), (13)(24), (14)(23); (3.6)
4. (123), (132), (124), (142), (134), (143), (234), (243);
5. (1234), (1243), (1324), (1342), (1423), (1432).

Em vez disso, utilizamos o resultado conhecido⁽²⁰⁾ que $S(4)$ pode ser decomposto como o produto semi-direto do subgrupo invariante $D(2)$ e do subgrupo $S(3)$ de $S(4)$, isto é,

$$S(4) = D(2) \wedge S(3) . \quad (3.7)$$

Assim, cada elemento ρ de $S(4)$ pode ser escrito como

$$\rho = d p \quad (3.8)$$

onde d é um elemento de $D(2)$ e p um elemento de $S(3)$. O operador de projeção para um estado simétrico do sistema de 4 partículas é então da seguinte forma

$$\mathcal{P} = \sum_{\rho \in S(4)} \rho = \sum_{p \in S(3)} (e + d_1 + d_2 + d_3)p . \quad (3.9)$$

É conveniente, agora, usar o sistema de coordenadas relativas de Kramer-Moshinsky definido em (2.14) para quatro partículas. Neste sistema de coordenadas, $D(2)$ é diagonal, como podemos ver através de suas representações, isto é,

$$e = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad d_1 = (23)(14) = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

$$d_2 = (13)(24) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad d_3 = (34)(12) = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} .$$

(3.10)

Então, o efeito das permutações de $D(2)$ pode ser obtido imediatamente e para simetrizar a função de onda necessitamos apenas aplicar as permutações de $S(3)$ que são seis, em vez das 24 de $S(4)$.

Aplicamos, então, o operador (3.9) a estados de oscilador harmônico nas coordenadas de Kramer-Moshinsky, os quais denotamos por

$$|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2 (\Lambda); n_3 \ell_3; \lambda \mu\rangle = \left[\left[\langle \vec{y}_1 | n_1 \ell_1 \rangle \langle \vec{y}_2 | n_2 \ell_2 \rangle \right]^\Lambda \langle \vec{y}_3 | n_3 \ell_3 \rangle \right]_{\lambda \mu} .$$

(3.11)

Note-se que usamos "kets" redondos para diferenciar dos estados na coordenadas de Jacobi, os quais estão indicados em (3.2) por "kets" angulares $|\rangle$. Para o estado fundamental do $^{16}_0$ ($\lambda=0$), podemos escrever (3.11) como

$$\begin{aligned} |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2 (\Lambda=\ell_3); n_3 \ell_3; 00\rangle &= \\ &= \left[\left[\langle \vec{y}_1 | n_1 \ell_1 \rangle \langle \vec{y}_2 | n_2 \ell_2 \rangle \right]^{\ell_3} \langle \vec{y}_3 | n_3 \ell_3 \rangle \right]_{00} , \end{aligned}$$

(3.12)

que para simplicidade de notação escrevemos como

$$|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2; n_3 \ell_3\rangle . \quad (3.13)$$

Lembramos que em (3.13) acoplamos $\vec{\ell}_1 + \vec{\ell}_2 = \vec{\Lambda}$ com $\vec{\ell}_3$ ($\vec{\ell}_3 = \vec{\Lambda}$) para obter λ final igual a zero. Se acoplamos $\vec{\ell}_1$ com o resultado de $\vec{\ell}_2 + \vec{\ell}_3$ para obter $\lambda=0$, teremos por (3.4) um único termo, a saber

$$|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2(\ell_3); n_3 \ell_3; 00\rangle = [(2\ell_1+1)(2\ell_3+1)]^{1/2} W(\ell_1 \ell_2 0 \ell_3; \ell_1 \ell_3) \times \\ \times |n_1 \ell_1; n_2 \ell_2, n_3 \ell_3(\ell_1); 00\rangle, \quad (3.14)$$

sendo que o coeficiente que aparece em (3.14) é igual a 1, como pode ser visto usando a relação⁽²²⁾

$$W(abcd; 0 f) = \frac{(-)^{a+c-f}}{[(2a+1)(2c+1)]^{1/2}} \delta(a,b) \delta(c,d) \quad (3.15)$$

e as regras de simetria dos coeficientes de Racah. (Os momentos angulares ℓ_1 , ℓ_2 e ℓ_3 são todos pares, como veremos mais tarde.) Portanto, para $\lambda=0$, temos

$$|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2; n_3 \ell_3\rangle = |n_1 \ell_1; n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle \quad (3.16)$$

que escrevemos genericamente como

$$|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle, \quad (3.17)$$

significando que a ordem do acoplamento é irrelevante. A ordem dos pares ($n\ell$) é porém significativa, isto é, o primeiro par sempre se refere à primeira coordenada \vec{y}_1 , o segundo à coordenada \vec{y}_2 e o terceiro par se refere a \vec{y}_3 .

Pode-se demonstrar que quando aplicamos as permutações (3.10) de D(2) aos estados (3.17) obtemos imediatamente⁽²³⁾,

$$e \quad |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle = |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle \quad (3.18)$$

$$d_1 \quad |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle = (-)^{\ell_2+\ell_3} |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle \quad (3.19)$$

$$d_2 \quad |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle = (-)^{\ell_1+\ell_3} |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle \quad (3.20)$$

$$d_3 \quad |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle = (-)^{\ell_1+\ell_2} |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle. \quad (3.21)$$

O efeito dos elementos de $D(2)$ sobre os estados (3.17) pode ser especificado pelo valor dos três momentos angulares (l_1, l_2, l_3) . Como cada elemento ρ de $S(4)$ pode ser decomposto como em (3.8), para simetrizar devemos aplicar todos os $\rho^{-1} = p^{-1}d^{-1} = p^{-1}d$ em (3.17). Em vista de (3.18 -3.21), o efeito de $D(2)$ é dado por

$$(e + d_1 + d_2 + d_3) |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle =$$

$$= \left[1 + (-)^{l_2+l_3} + (-)^{l_1+l_3} + (-)^{l_1+l_2} \right] |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle .$$

(3.22)

Precisamos agora aplicar as permutações de $S(3)$. Tome-mos (12) e (23) como geradores do grupo. Seus efeitos sobre (3.17) são

$$(12) |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = (-)^{l_1+l_2-l_3} |n_2 l_2, n_1 l_1, n_3 l_3\rangle \quad (3.23)$$

$$(23) |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle = (-)^{l_2+l_3-l_1} |n_1 l_1, n_3 l_3, n_2 l_2\rangle . \quad (3.24)$$

Como (12) e (23) são geradores de $S(3)$ o efeito das demais permutações pode ser obtido a partir de (3.23) e (3.24).

Lembramos que as diversas permutações consideradas sem pre se referem às coordenadas de laboratório das partículas. A tabela seguinte nos dá o resultado de todas as permutações de $S(3)$, (Ref.24), no caso geral de λ arbitrário.

p	$p n_1 \ell_1, n_2 \ell_2 (\Lambda); n_3 \ell_3; \lambda \mu$
(12)	$(-)^{\ell_1 + \ell_2 + \Lambda} n_2 \ell_2, n_1 \ell_1 (\Lambda); n_3 \ell_3; \lambda \mu$
(13)	$(-)^{\ell_1 + \ell_2 + \ell_3 + \lambda} \sum_{\Lambda'} [(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)]^{1/2} \times$ $\times W(\ell_1 \ell_2 \lambda \ell_3; \Lambda \Lambda') n_3 \ell_3, n_2 \ell_2 (\Lambda'); n_1 \ell_1; \lambda \mu$
(23)	$\sum_{\Lambda'} (-)^{\ell_1 + \lambda + \Lambda + \Lambda'} [(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)]^{1/2} \times$ $\times W(\ell_1 \ell_2 \ell_3 \lambda; \Lambda \Lambda') n_1 \ell_1, n_3 \ell_3 (\Lambda'); n_2 \ell_2; \lambda \mu$
(123)	$(-)^{\ell_3 + \lambda + \Lambda} \sum_{\Lambda'} [(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)]^{1/2} \times$ $\times W(\ell_1 \ell_2 \ell_3 \lambda; \Lambda \Lambda') n_3 \ell_3, n_1 \ell_1 (\Lambda'); n_2 \ell_2; \lambda \mu$
(132)	$\sum_{\Lambda'} (-)^{\ell_1 + \lambda + \Lambda'} [(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)]^{1/2} \times$ $\times W(\ell_1 \ell_2 \lambda \ell_3; \Lambda \Lambda') n_2 \ell_2, n_3 \ell_3 (\Lambda'); n_1 \ell_1; \lambda \mu$

Tabela 3.1

que para $\lambda=0$, fica,

p	$p n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle$
e	$ n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle$
(12)	$(-)^{\ell_1 + \ell_2 - \ell_3} n_2 \ell_2, n_1 \ell_1, n_3 \ell_3\rangle$
(13)	$(-)^{\ell_1 + \ell_3 + \ell_2} n_3 \ell_3, n_2 \ell_2, n_1 \ell_1\rangle$
(23)	$(-)^{\ell_2 + \ell_3 - \ell_1} n_1 \ell_1, n_3 \ell_3, n_2 \ell_2\rangle$
(123)	$ n_3 \ell_3, n_1 \ell_1, n_2 \ell_2\rangle$
(132)	$ n_2 \ell_2, n_3 \ell_3, n_1 \ell_1\rangle$

Tabela 3.2

Portanto, ao simetrizar o estado (3.17) chegamos à

$$\begin{aligned}
 \mathcal{P} |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle &= \left[1 + (-)^{\ell_2 + \ell_3} + (-)^{\ell_1 + \ell_3} + (-)^{\ell_1 + \ell_2} \right] \times \\
 &\{ [|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle + |n_3 \ell_3, n_1 \ell_1, n_2 \ell_2\rangle + |n_2 \ell_2, n_3 \ell_3, n_1 \ell_1\rangle] + \\
 &+ (-)^{\ell_1 + \ell_2 + \ell_3} [|n_2 \ell_2, n_1 \ell_1, n_3 \ell_3\rangle + |n_3 \ell_3, n_2 \ell_2, n_1 \ell_1\rangle + \\
 &+ |n_1 \ell_1, n_3 \ell_3, n_2 \ell_2\rangle] \} . \quad (3.25)
 \end{aligned}$$

A paridade do estado (3.17) é dada por $(-)^{\ell_1 + \ell_2 + \ell_3}$. Como para o caso do estado fundamental do ^{16}O a paridade do estado fundamental é positiva, devemos nos restringir ao caso em que a so-

ma $l_1+l_2+l_3$ é par. Isto somente pode ocorrer quando todos os l 's são pares ou então quando dois deles são ímpares. Neste último caso, o primeiro parêntese quadrado em (3.25) se anula. Portanto, sô nos interessa o caso em que todos os l 's são pares. Então, (3.25) fica, finalmente,

$$\begin{aligned}
 |n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle_S = A & \left[|n_1 l_1, n_2 l_2, n_3 l_3\rangle + |n_3 l_3, n_1 l_1, n_2 l_2\rangle \right. \\
 & + |n_2 l_2, n_3 l_3, n_1 l_1\rangle + |n_2 l_2, n_1 l_1, n_3 l_3\rangle \\
 & \left. + |n_3 l_3, n_2 l_2, n_1 l_1\rangle + |n_1 l_1, n_3 l_3, n_2 l_2\rangle \right]
 \end{aligned}
 \tag{3.26}$$

onde os estados $| \rangle$ são estados de O.H. de quatro partículas nas coordenadas de Kramer-Moshinsky com $\lambda=0$. O subíndice S é para indicar que o estado é simétrico. A é um coeficiente de normalização dado por

$$A = \begin{cases} \sqrt{1/6} & , \text{ se todos os pares } (n_s l_s) \text{ são diferentes} \\ 1/6 & , \text{ se todos os pares } (n_s l_s) \text{ são iguais} \\ \sqrt{1/12} & , \text{ se dois dos pares } (n_s l_s) \text{ são iguais} \end{cases} .$$

(3.27)

Construímos, então, explicitamente os estados normalizados de osciladores harmônicos translacionalmente invariantes para um sistema de quatro partículas que são simétricos sob troca de coordenadas, com momento angular orbital total nulo e paridade positiva.

Os estados (3.26) são os que tomaremos para expandir nossa função variacional, como em (3.1). Faremos a aproximação de 8 quantos, o que equivale, no nosso problema, a tomar 22 componentes, isto é, a aproximação é feita num espaço de dimensão 22, como podemos ver na tabela seguinte.

Tabela 3.3

Lista de estados até 8 quantos

$$N = 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 + 2n_3 + l_3$$

	n_1	l_1	n_2	l_2	n_3	l_3	A	N	
1	0	0	0	0	0	0	1/6	0	}N=0
2	0	0	0	0	1	0	$\sqrt{1/12}$	2	}N=2
3	1	0	1	0	0	0	$\sqrt{1/12}$	4	N=4
4	0	2	0	2	0	0	$\sqrt{1/12}$	4	
5	0	0	0	0	2	0	$\sqrt{1/12}$	4	
6	2	0	1	0	0	0	$\sqrt{1/6}$	6	N=6
7	1	2	0	2	0	0	$\sqrt{1/6}$	6	
8	0	2	0	2	1	0	$\sqrt{1/12}$	6	
9	0	0	0	0	3	0	$\sqrt{1/12}$	6	
10	1	0	1	0	1	0	1/6	6	
11	0	2	0	2	0	2	1/6	6	
12	3	0	1	0	0	0	$\sqrt{1/6}$	8	N=8
13	2	2	0	2	0	0	$\sqrt{1/6}$	8	
14	1	2	1	0	0	2	$\sqrt{1/6}$	8	
15	2	0	2	0	0	0	$\sqrt{1/12}$	8	
16	1	2	1	2	0	0	$\sqrt{1/12}$	8	
17	1	0	1	0	2	0	$\sqrt{1/12}$	8	
18	0	4	0	4	0	0	$\sqrt{1/12}$	8	
19	0	2	0	2	2	0	$\sqrt{1/12}$	8	
20	0	2	0	2	1	2	$\sqrt{1/12}$	8	
21	0	0	0	0	0	4	$\sqrt{1/12}$	8	

Para evitar repetições inúteis na tabela acima os pares $(n_s \ell_s)$ foram ordenados de acordo com a seguinte convenção. Em primeiro lugar, dizemos que os pares são distintos, isto é, $(n_s \ell_s) \neq (n_{s'} \ell_{s'})$, c/ $s, s' = 1, 2, 3$, se $\ell_s \neq \ell_{s'}$ ou $n_s \neq n_{s'}$ ou ambos. Se os três pares forem distintos, ordenamos de forma que $(n_1 \ell_1) > (n_2 \ell_2) > (n_3 \ell_3)$ onde por $(n_s \ell_s) > (n_{s'} \ell_{s'})$ queremos dizer que $n_s > n_{s'}$, ou se $n_s = n_{s'}$, que $\ell_s > \ell_{s'}$. Se dois pares são iguais, o par distinto corresponderá à $(n_3 \ell_3)$.

Utilizamos neste trabalho dois sistemas de coordenadas relativas distintos, sendo que o sistema definido por Kramer-Moshinsky foi útil, como vimos, quando aplicamos o operador de projeção, enquanto que as coordenadas relativas de Jacobi vão ser adequadas para o cálculo dos elementos de matriz do hamiltoniano. Devemos, então, obter uma relação entre os estados nos dois sistemas. Esta relação é dada em geral por

$$\begin{aligned}
 |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2(\Lambda); n_3 \ell_3; \lambda \mu\rangle &= \sum_{\substack{n_a \ell_a \\ n_b \ell_b}} \sum_{\substack{n_c \ell_c \\ \Lambda'}} |n_a \ell_a, n_b \ell_b(\Lambda'); n_c \ell_c; \lambda \mu\rangle \\
 &\times \langle n_a \ell_a, n_b \ell_b(\Lambda'); n_c \ell_c, \lambda | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2(\Lambda); n_3 \ell_3, \lambda \rangle
 \end{aligned}
 \tag{3.28}$$

onde os coeficientes da expansão são dados por ⁽²⁵⁾

$$\begin{aligned}
 &\langle n_a \ell_a, n_b \ell_b(\Lambda'); n_c \ell_c, \lambda | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2(\Lambda); n_3 \ell_3, \lambda \rangle = \\
 &= (-)^{\ell_c} [(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)]^{1/2} \sum_{\Lambda''} (2\Lambda''+1) W(\ell_a \ell_b \lambda \ell_c; \Lambda' \Lambda'') \times \\
 &W(\ell_a \ell_b \ell_c; \Lambda \Lambda'') \langle n_a \ell_a, n_b \ell_b, \Lambda | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \Lambda \rangle \times
 \end{aligned}$$

Os dois últimos coeficientes são os coeficientes de Moshinsky usuais e coeficientes de Moshinsky generalizados, respectivamente. Eles estão definidos no apêndice.

Nesta expansão a soma sobre Λ'' está restrita da maneira usual (regra de triangularidade de momentos angulares) e as somas em n, l estão limitadas pelas relações

$$2n + l = 2n_1 + l_1 + 2n_2 + l_2 - 2n_a - l_a \quad (3.30)$$

e

$$|\Lambda - l_a| \leq l \leq \Lambda + l_a \quad (3.31)$$

Podemos ainda acoplar como em (3.3) e teremos

$$|n_1 l_1; n_2 l_2, n_3 l_3(\Lambda); \lambda \mu\rangle = \sum_{\substack{n_a l_a \\ n_b l_b}} \sum_{\Lambda''} |n_a l_a; n_b l_b, n_c l_c(\Lambda''); \lambda \mu\rangle \times \\ \langle n_a l_a; n_b l_b, n_c l_c(\Lambda''), \lambda | n_1 l_1; n_2 l_2, n_3 l_3(\Lambda), \lambda \rangle \quad (3.32)$$

onde

$$\langle n_a l_a; n_b l_b, n_c l_c(\Lambda''), \lambda | n_1 l_1; n_2 l_2, n_3 l_3(\Lambda), \lambda \rangle = \\ = (-)^{l_c} [(2\Lambda+1)(2\Lambda''+1)]^{1/2} \sum_{\Lambda'' n l} (2\Lambda''+1) W(l_1 l_2 \lambda l_3; \Lambda'' \Lambda) \times \\ W(l_a l \lambda l_3; \Lambda'' \Lambda'') \langle n_a l_a, n l, \Lambda'' | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda'' \rangle \times \\ \langle n_b l_b, n_c l_c, \Lambda'' | n l, n_3 l_3, \Lambda'' \rangle_\beta \quad (3.33)$$

onde novamente as condições (3.30) e (3.31) restringem as somas.

A relação entre os coeficientes (3.29) e (3.33) é dada por

$$\begin{aligned}
& \langle n_a^{\ell_a}; n_b^{\ell_b}, n_c^{\ell_c} (\Lambda'), \lambda | n_1^{\ell_1}; n_2^{\ell_2}, n_3^{\ell_3} (\Lambda), \lambda \rangle = \\
& = \sum_{\bar{\Lambda}, \bar{\Lambda}'} \left[(2\Lambda+1)(2\Lambda'+1)(2\bar{\Lambda}+1)(2\bar{\Lambda}'+1) \right]^{1/2} W(\ell_a \ell_b \lambda \ell_c; \bar{\Lambda}' \Lambda') \times \\
& W(\ell_1 \ell_2 \lambda \ell_3; \bar{\Lambda} \Lambda) \langle n_a^{\ell_a}, n_b^{\ell_b} (\bar{\Lambda}'); n_c^{\ell_c}, \lambda | n_1^{\ell_1}, n_2^{\ell_2} (\bar{\Lambda}); n_3^{\ell_3}, \lambda \rangle.
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Usando as relações (3.28) e (3.29), com $\lambda=0$, $\Lambda'=l_c$, temos

$$\begin{aligned}
|n_1^{\ell_1}, n_j^{\ell_j}, n_k^{\ell_k}\rangle &= \sum_{n_a^{\ell_a}} \sum_{n_b^{\ell_b}} \sum_{n_c^{\ell_c}} |n_a^{\ell_a}, n_b^{\ell_b}(\ell_c); n_c^{\ell_c}, 00\rangle \times \\
& \langle n_a^{\ell_a}, n_b^{\ell_b}(\ell_c); n_c^{\ell_c}, 0 | n_1^{\ell_1}, n_j^{\ell_j}(\ell_k); n_k^{\ell_k}, 0 \rangle \\
& = \sum_{n_a^{\ell_a}} \sum_{n_b^{\ell_b}} \sum_{n_c^{\ell_c}} (-)^{\ell_c} \left[(2\ell_k+1)(2\ell_c+1) \right]^{1/2} \sum_{n\ell\Lambda''} |n_a^{\ell_a}, n_b^{\ell_b}, n_c^{\ell_c}\rangle \times \\
& \times (2\Lambda''+1) W(\ell_a \ell_b 0 \ell_c; \ell_c \Lambda'') W(\ell_a \ell_0 \ell_k; \ell_k \Lambda'') \times \\
& \langle n_a^{\ell_a}, n\ell, \ell_k | n_1^{\ell_1}, n_j^{\ell_j}, \ell_k \rangle \langle n_b^{\ell_b}, n_c^{\ell_c}, \Lambda'' | n\ell, n_k^{\ell_k}, \Lambda'' \rangle_{\beta}.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Através da relação (3.15) e das propriedades de simetria dos coeficientes de Racah, temos

$$W(\ell_a \ell_b 0 \ell_c; \ell_c \Lambda'') = \left[(2\ell_a+1)(2\ell_c+1) \right]^{-1/2} \delta_{\ell_a \Lambda''} \tag{3.36}$$

$$W(\ell_a \ell_0 \ell_k; \ell_k \Lambda'') = \left[(2\ell_a+1)(2\ell_k+1) \right]^{-1/2} \delta_{\ell_a \Lambda''} \tag{3.37}$$

Podemos então escrever (3.35) finalmente como

$$\begin{aligned}
 |n_i l_i, n_j l_j, n_k l_k\rangle &= \sum_{\substack{n_a l_a \\ n_b l_b}} \sum_{\substack{n_c l_c \\ n l}} |n_a l_a, n_b l_b, n_c l_c\rangle (-)^{l_c} \\
 &\times \langle n_a l_a, n l, l_k | n_i l_i, n_j l_j, l_k\rangle \langle n_b l_b, n_c l_c, l_a | n l, n_k l_k, l_a\rangle \beta,
 \end{aligned}
 \tag{3.38}$$

e cada componente em (3.26) fica expressa nas coordenadas relativas de Jacobi.

Como as forças que usaremos não dependem de spin ou isospin, podemos fazer toda nossa análise no espaço de configuração, de modo que encerramos aqui nossa discussão sobre a função de onda.

Passemos, então, a considerar os elementos de matriz na base que acabamos de construir.

4. Elementos de Matriz do Hamiltoniano Intrínseco

Consideramos o hamiltoniano do nosso problema,

$$\begin{aligned}
 H = \hbar\omega/2 \sum_{s=1}^n (\vec{p}_s)^2 + \sum_{s<t=2}^n [V_{\alpha\alpha}(s,t) + V_C(s,t)] + \\
 + \sum_{s<t<k=3}^n V_{3\alpha}(s,t,k) , \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

já tomando as variáveis como estando adimensionalizadas e sendo $n=4$ o número de partículas. O primeiro termo é a energia cinética; V_C é o potencial Coulombiano, tomando as partículas como sendo pontuais; $V_{\alpha\alpha}$ é o potencial de dois corpos e $V_{3\alpha}$ o potencial de três corpos. V_C , $V_{\alpha\alpha}$ e $V_{3\alpha}$ dependem das coordenadas relativas das partículas. As duas últimas somas são, respectivamente, sobre o número de pares e ternas possíveis em um sistema de quatro partículas.

O potencial de dois corpos que vamos considerar foi construído por Ali e Bodmer⁽⁹⁾. São potenciais α - α fenomenológicos dependentes do momento angular relativo e foram obtidos para $l=0,2,4$. Seus parâmetros foram ajustados a fim de reproduzir os defasamentos experimentais δ_0 , δ_2 e δ_4 associados com o espalhamento α - α . Esse potencial é uma superposição de gaussianas atrativas e repulsivas. Explicitamente, o potencial de Ali-Bodmer é indicado por

$$V_{\alpha\alpha}(s,t) = \sum_{l=0,2,4} \left[V_{R_l} \exp(-\mu_{R_l}^2 r_{st}^2) + V_{A_l} \exp(-\mu_{A_l}^2 r_{st}^2) \right] . \quad (4.2)$$

Usaremos o potencial (d'_0, d_2, d_4) de Ali-Bodmer cujos parâmetros estão listados na tabela abaixo.

l	V_{R_l} (MeV)	μ_{R_l} (fm^{-1})	V_{A_l} (MeV)	μ_{A_l} (fm^{-1})
0	475	0.7	-130	0.475
2	320	0.7	-130	0.475
4	10	0.7	-130	0.475

Tabela 4.1 - Parâmetros do potencial de Ali-Bodmer (d_0 d_2 d_4)

O potencial de três corpos é uma gaussiana atrativa do tipo

$$V_{3\alpha}(r_1, r_2, r_3) = V_{03} \exp\left[-\lambda(r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2)\right] \quad (4.3)$$

Para esta componente do potencial tomamos dois potenciais cujos parâmetros V_{03} e λ foram ajustados de formas diferentes. Primeiramente, consideramos o potencial de Portilho e Coon (16), que ajusta a energia de ligação do ^{12}C e os "gaps" entre os primeiro estados 0^+ e 2^+ . Esses autores obtiveram assim um potencial de 3 corpos atrativo de pouca intensidade e longo alcance. Os parâmetros ajustados encontram-se na tabela (4.2).

O segundo potencial estudado foi construído por Ogasawara e Hiura (17). Seus parâmetros foram ajustados para reproduzir o raio e a energia de ligação do ^{12}C . Este potencial é muito mais intenso do que o anterior, mas de alcance bem menor como pode ser visto na tabela (4.2).

	V_{03} (MeV)	λ (fm^{-2})
Portilho e Coon	-7	5.06×10^{-3}
Ogasawara	-200	0.25

Voltemos agora à discussão do hamiltoniano. Estamos interessados na parte intrínseca H_I do hamiltoniano H dado em (4.1), que é obtida quando subtraímos a energia do centro de massa,

$$H_I = H - \hbar\omega/2n \left[\sum_{s=1}^n (\vec{p}_s) \right]^2 \quad (4.4)$$

onde o momento do centro de massa é dado nas coordenadas de Jacobi por

$$\vec{p}_d = 1/\sqrt{n} \sum_{s=1}^n (\vec{p}_s) . \quad (4.5)$$

Por conveniência, somamos e subtraímos de (4.4) o termo

$$\frac{\hbar\omega}{2n} \sum_{s,t=1}^n (\vec{x}_s - \vec{x}_t)^2 = \hbar\omega \sum_{s=1}^{n-1} (\vec{x}_s)^2 , \quad (4.6)$$

e obtemos para $n=4$, nas coordenadas relativas de Jacobi,

$$H_I = \frac{\hbar\omega}{2} \left[p_a^2 + p_b^2 + p_c^2 + x_a^2 + x_b^2 + x_c^2 \right] + 6 \left[v_{\alpha\alpha}(x_a) + v_c(x_a) - \frac{\hbar\omega}{4} x_a^2 \right] + 4 v_{3\alpha}(x_a, x_b) . \quad (4.7)$$

Os fatores 6 e 4 que aparecem nesta expressão indicam o número de pares e ternas, respectivamente, existentes num sistema de quatro partículas. O primeiro termo de H_I é o hamiltoniano de três partículas nas coordenadas $\vec{x}_a, \vec{x}_b, \vec{x}_c$ em um potencial de O.H., cujos autovalores são dados por

$$E = [N + 9/2] \hbar\omega \quad (4.8)$$

sendo $N=2 \times (n_a + n_b + n_c) + l_a + l_b + l_c$ o número de quantos total.

Podemos, agora, escrever os elementos de matriz de H_I na base (3.26) como

$$\langle N' | H_I | N \rangle = \hbar\omega [N + 9/2] \delta_{N',N} + 6 \langle N' | v_{\alpha\alpha}(x_a) + v_c(x_a) - \frac{\hbar\omega}{4} x_a^2 | N \rangle + 4 \langle N' | v_{3\alpha}(x_a, x_b) | N \rangle \quad (4.9)$$

onde N designa genericamente todos os números quânticos do estado de 4 partículas. No nosso problema, N representa os números quânticos que aparecem em (3.17).

Faremos agora uma análise variacional para a energia. Como já foi discutido anteriormente, podemos fazer o cálculo variacional somente no espaço de configuração. Escrevemos nossa função de onda variacional como uma combinação linear de funções de osciladores harmônicos, ou seja,

$$|N\rangle = \phi = \sum a(n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3) |n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle_S \quad (4.10)$$

onde os estados $|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3\rangle_S$ são os discutidos na seção (3) e o índice S serve para indicar que já estão simetrizados. Os coeficientes $a(n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3)$ são os parâmetros variacionais do problema. O parâmetro do oscilador será variado discretamente uma vez que entra na análise de forma não linear.

Faremos agora uma aproximação até $N=8$, que corresponde a tomar 22 componentes para a função variacional, como foi mostrado na tabela (3.3). O número de quantos total N é dado por

$$N = 2n_1 + \ell_1 + 2n_2 + \ell_2 + 2n_3 + \ell_3 . \quad (4.11)$$

Queremos então minimizar

$$E = \int \phi^* H_I \phi \, d\tau \quad (4.12)$$

sujeita ao vínculo usual de normalização, isto é,

$$\int \phi^* \phi \, d\tau = 1 . \quad (4.13)$$

Este problema é equivalente à diagonalização da matriz do hamiltoniano H_I na base $| \rangle_S$. A matriz a ser diagonalizada é de dimensão 22 como mencionamos acima. Faremos as aproximações sucessivas de 0, 2, 4, 6 e 8 quantos que correspondem a diagonalizar a matriz do H_I em espaços de dimensão 1, 2, 5, 11 e 22, respectiva

mente. Diagonalizamos, portanto, a matriz de 8 quantos e suas submatrizes nos espaços mencionados, referentes a números menores de quantos.

Calculemos, então, os elementos de matriz do hamiltoniano intrínseco com relação aos estados (3.26). Estes estados estão escritos em termos de estados nas coordenadas de Kramer-Moshinsky do tipo (3.17) e podem ser desenvolvidos em termos de estados nas coordenadas de Jacobi pela relação (3.38). O primeiro termo que aparece em (4.9) já está diagonalizado. Os elementos de matriz para os outros termos são essencialmente elementos de matriz dos tipos seguintes

$$(n'_i l'_i, n'_j l'_j, n'_k l'_k | V_{\alpha\alpha}(X_a) + V_c(X_a) - \hbar\omega/4 X_a^2 | n_i l_i, n_j l_j, n_k l_k) \quad (4.14)$$

e

$$(n'_i l'_i, n'_j l'_j, n'_k l'_k | V_{3\alpha}(X_a, X_b) | n_i l_i, n_j l_j, n_k l_k) . \quad (4.15)$$

Em (4.14) temos as diversas contribuições de dois corpos enquanto que (4.15) dará a contribuição do potencial de três corpos. Precisamos então escrever os "bras" e os "kets" de (4.14) e (4.15) nas coordenadas de Jacobi. Para isso utilizamos os coeficientes de transformação (3.38) correspondentes, discutidos anteriormente, resultando

$$\begin{aligned} & (n'_i l'_i, n'_j l'_j, n'_k l'_k | V_{\alpha\alpha}(X_a) + V_c(X_a) - \hbar\omega/4 X_a^2 | n_i l_i, n_j l_j, n_k l_k) \\ &= \sum_{n'_k} \sum_{n'_a} \sum_{n'_l} \delta_{l'_k l_k} \delta_{n'_k n_k} \delta_{n'_a n_a} \delta_{n'_l n_l} \langle n'_a l'_a || V_{\alpha\alpha}(X_a) + V_c(X_a) - \hbar\omega/4 X_a^2 || n_a l_a \rangle \\ & \times \langle n'_a l'_a, n'_l, l'_k | n'_i l'_i, n'_j l'_j, l'_k \rangle \langle n_a l_a, n_l, l_k | n_i l_i, n_j l_j, l_k \rangle , \quad (4.16) \end{aligned}$$

onde as somas estão restritas pelas propriedades dos bras e kets

aparece em (4.16) pode ser expresso em termos de integrais de Talmi, isto é,

$$\langle n' \ell' || f(r) || n \ell \rangle = \sum_p B(n' \ell', n \ell, p) I_p(f)$$

onde $B(n' \ell', n \ell, p)$, $1/2 (\ell + \ell') \leq p \leq 1/2 (\ell + \ell') + n + n'$, são coeficientes conhecidos e tabelados por Brody e Moshinsky⁽²⁶⁾ e

$$I_p = \frac{2}{(p+3/2)} \int_0^\infty r^{2p+2} f(r) e^{-r^2} dr \quad (4.17)$$

são as integrais de Talmi de $f(r)$ (27).

As integrais de Talmi que nos interessarás podem ser obtidos da tabela abaixo, de fácil construção à partir da definição (4.17).

$f(r)$	I_p
r^λ	$\frac{\Gamma(p+\lambda/2+3/2)}{\Gamma(p+3/2)}$
$e^{-\alpha^2 r^2}$	$(1+\alpha^2)^{-p-3/2}$
$1/r$	$\frac{p!}{\Gamma(p+3/2)}$

Tabela 4.3 - Integrais de Talmi

Podemos então escrever o elemento de matriz reduzido que aparece em (4.16), como

$$\langle n'_a \ell'_a || V_{\alpha\alpha}(X_a) + V_c(X_a) - \hbar\omega/4 X_a^2 || n_a \ell_a \rangle =$$

$$= \sum_{p=\ell_a}^{\ell_a+n'_a+n_a} B(\ell'_a \ell'_a, n_a \ell_a, p) \left\{ \sum_{\ell=0,2,4} \left[\frac{V_{R\ell}}{(1+\alpha_{R\ell}/\epsilon)^{p+3/2}} + \frac{V_{A\ell}}{(1+\alpha_{A\ell}/\epsilon)^{p+3/2}} \right] \right\}$$

Nos resultados acima, a frequência dos osciladores está contida em

$$\epsilon = \frac{\hbar\omega}{m_0 c^2}, \quad (4.19)$$

onde $m_0 c^2 = 0.511$ MeV é um fator de escala de energia arbitrário, ao qual também serão referidas todas as intensidades dos diversos potenciais presentes. Isto está indicado pelas letras minúsculas representando os potenciais, isto é, as diversas energias estão dadas em unidades de $m_0 c^2$. As constantes α_{R_ℓ} , α_{A_ℓ} e κ são definidas por

$$\alpha_{R_\ell, A_\ell} = 2\beta u^2_{R_\ell, A_\ell}; \quad \beta = \frac{(\hbar c)^2}{m_\alpha c^2 m_0 c^2}; \quad \kappa = \frac{e^2}{\hbar c} \sqrt{\frac{8m_\alpha c^2}{m_0 c^2}}, \quad (4.20)$$

sendo m_α a massa da partícula alfa. Aproveitamos a oportunidade acima para introduzir a constante β que aparecerá em seguida.

Notamos em (4.16) que se trocamos os pares $(n_1 l_1) \leftrightarrow (n_j l_j)$ ou $(n'_1 l'_1) \leftrightarrow (n'_j l'_j)$ ou ambos não vamos obter resultados novos, pois o único lugar onde aparecem é nos brashinskets, e usando as propriedades de simetria destes coeficientes [Apêndice (A.9)], vemos que (4.16) é invariante pelas trocas mencionadas. Levando isto em conta, diminuimos drasticamente o número de elementos de matriz que aparecem no cálculo de H_I , o que reduz bastante o tempo de computação.

Para o elemento de matriz da componente de três corpos do potencial (4.15) teremos,

$$\begin{aligned} & (n'_1 l'_1, n'_j l'_j, n'_k l'_k | V_{3\alpha}(X_a, X_b) | n_1 l_1, n_j l_j, n_k l_k) = \\ & = \sum_{n_a l_a} \sum_{n_d l_d} \sum_{n_c l_c} \langle n_a l_a, n_d l_d, l_k | n_1 l_1, n_j l_j, l_k \rangle \times \\ & \quad n'_a l'_a \quad l'_d l'_d \quad n'_c l'_c \\ & \quad n'_a l'_a \quad n_b l_b \quad n'_b l'_b \end{aligned}$$

$$\langle n_b' l_b, n_c' l_c | n_d' l_d, n_k' l_k, l_a \rangle_\beta \langle n_b' l_b', n_c' l_c', l_a' | n_d' l_d', n_k' l_k', l_a' \rangle_\beta \times$$

$$\langle n_a' l_a', n_b' l_b' || V_{3\alpha}(X_a, X_b) || n_a l_a, n_b l_b \rangle \quad (4.21)$$

onde as somas estão restritas novamente pelas propriedades de simetria dos brashinskets. Uma vez que podemos escrever o potencial de 3 corpos como

$$V_{3\alpha}(X_a, X_b) = V_{03} e^{-3\lambda(X_a^2 + X_b^2)} = f(X_a) \cdot f(X_b), \quad (4.22)$$

o elemento de matriz reduzido pode ser fatorizado da seguinte forma

$$\langle n_a' l_a', n_b' l_b' || V_{3\alpha}(X_a, X_b) || n_a l_a, n_b l_b \rangle =$$

$$= V_{03} \langle n_a' l_a' || e^{-3\lambda X_a^2} || n_a l_a \rangle \langle n_b' l_b' || e^{-3\lambda X_b^2} || n_b l_b \rangle \delta_{l_a' l_a} \delta_{l_b' l_b}$$

$$= V_{03} \delta_{l_a' l_a} \delta_{l_b' l_b} \sum_{pq} B(n_a' l_a', n_a l_a, p) B(n_b' l_b', n_b l_b, q) \left(1 + \frac{3\lambda\beta}{\epsilon}\right)^{-p-q-3},$$

$$(4.23)$$

em termos das integrais de Talmi. Os índices de soma p e q assumem os valores

$$l_a \leq p \leq l_a + n_a' + n_a \quad \text{e} \quad l_b \leq q \leq n_b' + n_b + l_b.$$

Novamente podemos usar as propriedades de simetria dos brashinskets e brashinskets generalizados, que são expressos em termos de produto de brashinskets usuais como podemos ver em (A.13), do apêndice. Notamos que quando trocamos os pares $(n_i l_i) \leftrightarrow (n_j l_j)$ ou $(n_i' l_i') \leftrightarrow (n_j' l_j')$ não obtemos nenhum resultado novo.

Resumindo, os elementos de matriz do hamiltoniano intrínseco têm a seguinte forma

$$\begin{aligned}
 & S(n_1^{\prime} \ell_1^{\prime}, n_2^{\prime} \ell_2^{\prime}, n_3^{\prime} \ell_3^{\prime} | H_I | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3) S = \hbar \omega (N+9/2) \delta_{n_1^{\prime} n_1} \delta_{\ell_1^{\prime} \ell_1} \\
 & \times \delta_{n_2^{\prime} n_2} \delta_{\ell_2^{\prime} \ell_2} \delta_{n_3^{\prime} n_3} \delta_{\ell_3^{\prime} \ell_3} + \\
 & + 6 S(n_1^{\prime} \ell_1^{\prime}, n_2^{\prime} \ell_2^{\prime}, n_3^{\prime} \ell_3^{\prime} | V_{\alpha\alpha}(r_{12}) + V_c(r_{12}) - \frac{\hbar \omega}{8} r_{12}^2 | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3) S \\
 & + 4 S(n_1^{\prime} \ell_1^{\prime}, n_2^{\prime} \ell_2^{\prime}, n_3^{\prime} \ell_3^{\prime} | V_{03} \exp[-\lambda(r_{12}^2 + r_{13}^2 + r_{23}^2)] | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3) S
 \end{aligned}
 \tag{4.24}$$

onde o segundo e o terceiro termo são desenvolvidos em elementos de matriz do tipo (4.16) e (4.21), respectivamente.

O cálculo dos elementos de matriz (4.24) é bastante simplificado do ponto de vista computacional quando usamos as propriedades de simetria discutidas. Porém, notamos que o elemento de matriz (4.21) do potencial de três corpos utiliza muito os brashinskets generalizados. Estes coeficientes, entretanto, requerem muito tempo de computação. Com o intuito de minimizar os custos operacionais, além de tabelas, fizemos um novo cálculo expandindo a gaussiana de V_3 . A fórmula final obtida é escrita em termos de coeficientes de Racah e funções hipergeométricas, reduzindo os custos de computador a menos da metade do valor original! Vamos, então, em seguida, colocar em uma forma mais conveniente, para propósitos de computação, o elemento de matriz de três corpos, a saber,

$$\text{MAT3} = (n_1^{\prime} \ell_1^{\prime}, n_2^{\prime} \ell_2^{\prime}, n_3^{\prime} \ell_3^{\prime} | f(X_a, X_b) | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, n_3 \ell_3) \tag{4.25}$$

onde

$$f(x_a, x_b) = h(x_a) \cdot g(x_b) = e^{-3\lambda(x_a^2 + x_b^2)} = e^{-3\lambda x_a^2} e^{-3\lambda x_b^2} \quad (4.26)$$

Uma vez que a função (4.26) é separável, fazemos uma nova mudança de coordenadas. Inicialmente passamos para as coordenadas \vec{y}_s de Kramer-Moshinsky (2.14) e em seguida usamos, para obter coordenadas que nos facilitarão nos cálculos posteriores, a seguinte transformação ortogonal,

$$\begin{cases} \vec{y}_1 = \vec{y}_1 \\ \vec{y} = \sqrt{1/2} (\vec{y}_2 - \vec{y}_3) \\ \vec{y} = \sqrt{1/2} (\vec{y}_2 + \vec{y}_3) \end{cases} \quad (4.27)$$

Assim, teremos

$$\begin{aligned} x_a^2 + x_b^2 &= y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 - x_c^2 = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2 - \frac{1}{3} (\vec{y}_1 + \vec{y}_2 + \vec{y}_3)^2 \\ &= y^2 + \frac{2}{3} y_1^2 + \frac{1}{3} y^2 - \frac{2\sqrt{2}}{3} \vec{y}_1 \cdot \vec{y} \quad , \end{aligned} \quad (4.28)$$

e (4.26) fica

$$f(x_a, x_b) = e^{-3\lambda y^2} \cdot e^{-\lambda [\sqrt{2} \vec{y}_1 - \vec{y}]^2} \quad (4.29)$$

Expandimos em seguida a segunda exponencial de (4.29) em termos de harmônicos esféricos e funções de Bessel, usando a relação (28)

$$e^{-\gamma(\vec{a}-\vec{b})^2} = \sum_{\ell} i^{-\ell} (2\ell+1) e^{-\gamma(a^2+b^2)} j_{\ell}(2i\gamma ab) C_{\ell}(\theta_a, \phi_a) \cdot C_{\ell}(\theta_b, \phi_b)$$

(4.30)

onde o produto escalar dos C_{ℓ} é dado por (29)

$$C_{\ell} \cdot C_{\ell'} = \sum_q (-)^q C_{\ell q}(\theta, \phi) C_{\ell-q}(\theta', \phi'). \quad (4.31)$$

Os $C_{\ell q}$ são harmônicos esféricos modificados, definidos como

$$C_{\ell q} = \left(\frac{4\pi}{2\ell+1}\right)^{1/2} Y_{\ell q}. \quad (4.32)$$

Tomando $\vec{\rho} = \sqrt{2} \vec{Y}_1$, temos finalmente que

$$\begin{aligned} e^{-\lambda [\sqrt{2} \vec{Y}_1 - \vec{Y}]^2} &= e^{-\lambda [\vec{\rho} - \vec{Y}]^2} = \\ &= 4\pi \sum_{\ell, m} (-)^m (i)^{-\ell} e^{-\lambda (\vec{\rho}^2 + Y^2)} j_{\ell}(2i\gamma\rho Y) Y_{\ell m}(\Omega_{Y_1}) Y_{\ell-m}(\Omega_{Y_2}). \end{aligned} \quad (4.33)$$

Faremos, agora, uma mudança de base dos estados em (4.25) para estados nas coordenadas (4.27). Os números quânticos n_1, ℓ_1 se referem a coordenada \vec{Y}_1 e n_a, ℓ_a, n_b, ℓ_b se referem a \vec{Y} e \vec{Y} , respectivamente. Então, usando a eq. (A.6) do apêndice, temos,

$$\begin{aligned} |n_1 \ell_1, n_j \ell_j, n_k \ell_k\rangle &= \sum_{\substack{n_a \ell_a \\ n_b \ell_b}} |n_1 \ell_1, n_a \ell_a, n_b \ell_b\rangle \times \\ &\times (n_a \ell_a, n_b \ell_b, \ell_1 | n_j \ell_j, n_k \ell_k, \ell_1) \end{aligned} \quad (4.34)$$

Os coeficientes que aparecem em (4.34) são brashinskets usuais, uma vez que a transformação (4.27) é idêntica à (A.6) que define tais coeficientes. Em seguida desacoplamos os estados (4.34) em um produto de dois estados de oscilador, da seguinte forma

$$\begin{aligned} |n_1 \ell_1, n_a \ell_a, n_b \ell_b\rangle &= |n_a \ell_a, n_1 \ell_1, n_b \ell_b\rangle (-)^{\ell_1 + \ell_a - \ell_b} = \\ &= \sum_{m_a, m'_a} |n_a \ell_a m_a\rangle |n_1 \ell_1, n_b \ell_b; \ell_a m'_a\rangle \times \end{aligned}$$

onde

$$|n_i l_i, n_b l_b; l_a m_a\rangle = [\phi_{n_i l_i}(\vec{Y}_1) \phi_{n_b l_b}(\vec{Y})]_{l_a, m_a},$$

conforme (2.9).

Então, usando (4.29) e (4.35) podemos escrever o elemento de matriz (4.25) como

$$\begin{aligned} \text{MAT3} = & \sum_{n_a l_a} \sum_{n_b l_b} \sum_{m_a m_a'} (n_a l_a, n_b l_b, l_i | n_j l_j, n_k l_k, l_i) \times \\ & n_a' l_a' \quad n_b' l_b' \quad \mu_a \\ & (n_a' l_a', n_b' l_b', l_i' | n_j' l_j', n_k' l_k', l_i') \times (-)^{l_i + l_i' - l_b - l_b'} \\ & (l_a m_a l_a m_a' | 00) (l_a m_a l_a \mu_a | 00) (n_a' l_a' || e^{-\lambda Y^2} || n_a l_a) \times \\ & (n_i' l_i', n_b' l_b'; l_a \mu_a | e^{-\lambda [\sqrt{2} \vec{Y}_1 - \vec{Y}]^2} | n_i l_i, n_b l_b; l_a m_a) . \end{aligned} \quad (4.36)$$

O primeiro elemento de matriz que aparece nesta expressão, o elemento de matriz reduzido, pode ser calculado facilmente usando integrais de Talmi, como fizemos anteriormente. Para o segundo elemento de matriz, inicialmente desacoplamos o "bra" e o "ket" correspondentes de acordo com

$$|n_i l_i, n_b l_b; l_a m_a\rangle = \sum_{m_i m_b} |n_i l_i m_i\rangle |n_b l_b m_b\rangle (l_i m_i l_b m_b | l_a m_a) . \quad (4.37)$$

Em seguida usamos a expansão para a exponencial em (4.33) obtendo para o segundo elemento de matriz a expressão

$$\begin{aligned}
& (n_i' \ell_i', n_b' \ell_b'; \ell_a \mu_a | e^{-\lambda [\sqrt{2} \hat{Y}_1 - \hat{Y}]^2} | n_i \ell_i, n_b \ell_b; \ell_a m_a) = \\
& = \sum_{\ell_m} \sum_{\substack{m_i m_b \\ m_i' m_b'}} (-)^m (i)^{-\ell} (\ell_i m_i \ell_b m_b | \ell_a m_a) (\ell_i' m_i' \ell_b' m_b' | \ell_a \mu_a) \times \\
& (2\ell+1) \left[\frac{(2\ell_i+1)(2\ell_b+1)}{(2\ell_i'+1)(2\ell_b'+1)} \right]^{1/2} (\ell_i m_i \ell_m | \ell_i' m_i') (\ell_b m_b \ell-m | \ell_b' m_b') \times \\
& (\ell_i 0 \ell 0 | \ell_i' 0) (\ell_b 0 \ell 0 | \ell_b' 0) \times \\
& (n_i' \ell_i' | n_b' \ell_b' | e^{-\lambda \rho^2} \cdot e^{-\lambda Y^2} j_\ell(2i\lambda \rho Y) | n_b \ell_b) | n_i \ell_i) \quad (4.38)
\end{aligned}$$

onde usamos o teorema de Wigner-Eckart. Podemos então resolver a integral em (4.38), integrando primeiro em \hat{Y} e depois em $\hat{\rho}$. Assim,

$$\begin{aligned}
& (n_b' \ell_b' | e^{-\lambda Y^2} j_\ell(2i\lambda \rho Y) | n_b \ell_b) = \sum_p B(n_b' \ell_b', n_b \ell_b, p) I_p = \\
& = \sum_p B(n_b' \ell_b', n_b \ell_b, p) \frac{1^\ell \lambda^\ell \Gamma(3/2) \Gamma(p + \ell/2 + 3/2)}{\Gamma(p + \frac{3}{2}) \Gamma(\ell + \frac{3}{2}) (\lambda+1)} \times \\
& \rho^\ell {}_1F_1(\ell/2 + p + 3/2, \ell + 3/2; \lambda^2 \rho^2 / \lambda + 1) \quad (4.39)
\end{aligned}$$

onde usamos o resultado (30)

$$\begin{aligned}
& \int_0^\infty J_\nu(ax) e^{-\rho^2 x^2} x^{\mu-1} dx = \\
& = \frac{a^\nu \Gamma(\frac{1}{2} \mu + \frac{1}{2} \nu)}{2^{\nu+1} \rho^{\mu+\nu} \Gamma(\nu+1)} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} \mu + \frac{1}{2} \nu; \nu+1; \frac{-a^2}{4\rho^2}\right) .
\end{aligned}$$

A função ${}_1F_1$ é a função hipergeométrica confluyente. Integrando agora em ρ teremos,

$$\begin{aligned}
 & (n'_i l'_i | e^{-\lambda \rho^2} \rho^\ell {}_1F_1(\ell/2 + p + 3/2; \ell + 3/2; \frac{\lambda^2 \rho^2}{\lambda + 1} | n_i l_i) = \\
 & \sum_q B(n'_i l'_i, n_i l_i, q) I_q [e^{-\lambda \rho^2} \rho^\ell {}_1F_1] = \\
 & = \sum_q B(n'_i l'_i, n_i l_i, q) \frac{\Gamma(q + \ell/2 + 3/2) (\sqrt{2})^\ell}{\Gamma(q + 3/2) (2\lambda + 1)^{q + \ell/2 + 3/2}} \times \\
 & {}_2F_1(p + \ell/2 + 3/2, q + \ell/2 + 3/2; \ell + 3/2; \frac{2\lambda^2}{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)}) \quad (4.41)
 \end{aligned}$$

onde usamos o resultado 7.621/4 - pg 860 de "Table of Integral, Series, and Products" - I.S. Gradshteyn - I.M. Ryzhik (Academic-Press-1965).

Resumimos estes resultados escrevendo (4.36) sob a forma

$$\begin{aligned}
 \text{MAT3} &= \sum_{\substack{n_a^{\ell_a} \\ n_a^{\ell'_a}}} \sum_{\substack{n_b^{\ell_b} \\ n_b^{\ell'_b}}} \sum_{pq} (\ell_i 0 \ell_0 | \ell'_i 0) (\ell_b 0 \ell_0 | \ell'_b 0) (\sqrt{2})^\ell \times \\
 & (n'_a \ell'_a || e^{-3\lambda y^2} || n_a \ell_a) [(2\ell_i + 1)(2\ell_b + 1)]^{1/2} (2\ell + 1) \times \\
 & (n_a^{\ell_a}, n_b^{\ell_b}, \ell_i | n_j^{\ell_j}, n_k^{\ell_k}, \ell_i) (n'_a \ell'_a, n'_b \ell'_b, \ell'_i | n'_j \ell'_j, n'_k \ell'_k, \ell'_i) \times \\
 & B(n'_b \ell'_b, n_b \ell_b, p) B(n'_i \ell'_i, n_i \ell_i, q) W(\ell'_i \ell'_b \ell_i \ell_b; \ell_a \ell) \times \\
 & \frac{\lambda^\ell \Gamma(3/2) \Gamma(p + \ell/2 + 3/2) \Gamma(q + \ell/2 + 3/2)}{\Gamma(q + 3/2) \Gamma(p + 3/2) \Gamma(\ell + 3/2) (\lambda + 1)^{p + \ell/2 + 3/2} (2\lambda + 1)^{q + \ell/2 + 3/2}} \times \\
 & {}_2F_1(p + \ell/2 + 3/2, q + \ell/2 + 3/2; \ell + 3/2; \frac{2\lambda^2}{(\lambda + 1)(2\lambda + 1)}) \quad ,
 \end{aligned} \quad (4.42)$$

onde foram usadas propriedades conhecidas dos coeficientes de Clebsch-Gordan e de Racah. Notamos novamente que se trocamos os pares, agora $(n_j l_j) \leftrightarrow (n_k l_k)$ ou $(n'_j l'_j) \leftrightarrow (n'_k l'_k)$, nenhum resultado novo é obtido e que as somas em (4.42) estão restritas pelas propriedades do brashinskets. Levando em conta ainda as propriedades dos coeficientes de Clebsch-Gordan e brashinskets envolvidos na soma (4.42) verificamos que todos os índices l 's de soma assumem apenas valores pares.

Passaremos agora a análise dos resultados obtidos diagonalizando a matriz do hamiltoniano intrínseco de 8 quantos e suas submatrizes nos sub-espacos mencionados anteriormente.

5. Resultados e Conclusões

Neste trabalho, como já foi mencionado, adicionamos ao potencial α - α de Ali-Bodmer⁽⁹⁾, um potencial de três corpos, descrito em termos de uma gaussiana e com parâmetros ajustados fenomenologicamente.

Estudamos os potenciais sugeridos por Portilho-Coon⁽¹⁶⁾ e Ogasawara-Hiura⁽¹⁷⁾, nas aproximações de até 6 e 8 quantos, respectivamente. O primeiro potencial foi ajustado para reproduzir a energia de ligação do estado fundamental e os primeiros "gaps" 0^+ e 2^+ do ^{12}C . É um potencial de pouca intensidade e longo alcance (tabela 4.2). Os parâmetros do segundo potencial usado, foram ajustados para reproduzir o raio e a energia de ligação do estado fundamental do ^{12}C . É um potencial de grande intensidade e curto alcance, como pode ser visto na mesma tabela.

Inicialmente, fizemos os cálculos para a energia de ligação usando somente o potencial de Ali-Bodmer de dois corpos, e os resultados obtidos confirmam aqueles encontrados por Mendez-Moreno, Moreno e Seligman⁽¹⁰⁾, isto é, encontramos, fazendo uma aproximação de 10 quantos, um mínimo da energia em $\epsilon = 13$ e uma energia de ligação de -4.8 MeV, como pode ser visto na tabela (5.1). O valor experimental da energia de ligação do ^{16}O em relação à dissociação em quatro partículas alfas, isto é, $^{16}\text{O}(\gamma, 4\alpha)$, é de -14.5 MeV⁽³¹⁾.

Podemos notar que a energia obtida usando somente o potencial de dois corpos de Ali-Bodmer é de aproximadamente 30% do valor experimental. Esta foi uma das razões que nos levaram a estudar a contribuição de uma força de três corpos no ^{16}O .

Os resultados apresentados nas tabelas (5.1) e (5.2) foram obtidos usando somente o potencial de 2 corpos até 8 quantos. O melhor valor da energia de ligação na aproximação de 8 quantos é de -3.53 MeV, com $\epsilon = 13$, enquanto que na aproximação de 6 quantos é de -2.92 MeV, com $\epsilon = 11$. Notamos então, como era de se esperar, que quanto maior é o número de quantos usado na aproximação, melhores são os resultados obtidos, o que pode ser visto também na figura (5.1).

Os cálculos usando potenciais de três corpos foram feitos nas aproximações de 6 e 8 quantos. A aproximação de dez quantos requer um espaço de dimensão 40 enquanto que para 6 e 8 quantos a função variacional tem 11 e 22 componentes, respectivamente (ver tabela (3.3)), o que implica num tempo de computação muito menor e já nos dá uma boa idéia a respeito do método utilizado neste trabalho e das contribuições dos potenciais de três corpos, como veremos.

Para o potencial de Portilho-Coon, obtivemos a energia mínima de -25.80 MeV, em $\epsilon = 11$, para $N = 6$. Fizemos a aproximação somente até 6 quantos, uma vez que para este valor de N o sistema já está sobreligando, o que pode ser visto na tabela (5.3). A tabela (5.4) nos mostra os níveis de energia 0^+ para aquele potencial na aproximação de 6 quantos.

Para o potencial de Ogasawara-Hiura, fizemos a aproximação até 8 quantos. A energia mínima obtida foi de -4.74 MeV em $\epsilon = 15$ (tabela (5.5)). A tabela (5.6) nos mostra os níveis de energia para esse potencial.

A figura (5.1) nos mostra a variação da energia, obtida através da diagonalização da matriz do hamiltoniano em função do parâmetro ϵ do oscilador, para os diversos potenciais e aproximações considerados.

Comparando os resultados encontrados quando adicionamos a força de três corpos com aqueles em que usamos somente a força de dois corpos, notamos que a contribuição da força $3-\alpha$ é apreciável. No caso do potencial de Portilho-Coon, a contribuição é de aproximadamente 22.9 MeV para $N = 6$, ou seja, aproximadamente 5.7 MeV por terna de α , fazendo com que o sistema sobreligue.

Para o potencial de Ogasawara-Hiura, esta contribuição é de cerca de 1.2 MeV para $N = 8$, ou seja, 0.3 MeV por terna de α , o que equivale a aproximadamente 27% do resultado total obtido.

Verificamos que para $N = 8$, isto é, 22 componentes na função de onda, usando o potencial de Ogasawara-Hiura já obtivemos praticamente a mesma energia que encontramos usando somente a força de dois corpos com $N = 10$, isto é, com 40 componentes. Esperamos, portanto, que para uma aproximação maior, por exemplo $N = 10$, seja encontrado um resultado bastante mais próximo do experimental, uma vez que na aproximação de 10 quantos a dimensão do espaço praticamente dobra.

Além de aumentar o número de quantos na aproximação, outra proposta seria tomar uma função variacional com componentes de outras simetrias no espaço de configuração além da simétrica.

Fizemos também um estudo dos intervalos de energia entre os primeiros níveis 0^+ . As tabelas (5.7) e (5.8) nos mostram os resultados obtidos para os diversos valores do parâmetro ϵ , nas aproximações de 6 e 8 quantos. Podemos notar que para $N = 8$, o ϵ que melhor se ajusta ao experimental é da ordem de 13.

A tabela (5.9) nos mostra os valores desses "gaps" para o ϵ que dá a energia mínima em cada caso. Notamos que para $N = 8$ os

do valor experimental, o que indica que a aproximação de 6 quantaos é ainda muito pobre. Estes resultados podem ser melhor apreciados, observando as figuras (5.2) e (5.3).

Atualmente, J.N. Maki⁽³²⁾, está calculando o fator de forma para o ^{16}O usando o potencial de Ogasawara-Hiura. Esperamos que estes resultados sejam bons, uma vez que o "overlap" entre a função obtida usando o hamiltoniano completo e a obtida usando somente o potencial de Ali-Bodmer é muito bom, a saber, $\langle \psi_2 | \psi_3 \rangle = 0.9919$. Cálculos feitos anteriormente usando só a força de dois corpos⁽¹⁰⁾ mostraram bons resultados para o fator de forma, espera-se, portanto, poder melhorá-los. Para o potencial de Portilho-Coon também encontramos um grande "overlap", isto é, $\langle \psi_2 | \psi_3 \rangle = 0.9999$, o que indica que o potencial desses autores não interfere muito na função de onda.

No caso do potencial de Portilho-Coon, apesar de sua pequena intensidade, acredita-se que a grande contribuição para a energia encontrada seja devida ao longo alcance deste potencial, uma vez que a intensidade do potencial de curto alcance de Hiura-Ogasawara sendo cerca de trinta vezes maior não indica que vá haver sobreligação do sistema.

É provável que a força de três corpos não seja tão efetiva nos estados excitados. Se assim for, será necessária muita cautela ao se usar esses estados no ajuste dos parâmetros de tais potenciais.

Tabela (5.1) - Oxigênio - Est. Fundamental - Pot. Ali-Bodmer - 2 corpos

ϵ \ N	0	2	4	6	8	10
3	53.21162903	22.1002442	10.8415142	5.9581120		
5	111.36380780	43.1334341	16.7491497	3.6863610		
7	178.86131043	69.6700677	24.6481235	0.1134481		
9	250.095563	100.6310266	35.4797761	-2.5373824		
11	321.75362807	134.9297104	49.4729355	-2.9235966	-3.2499505	
13	391.95457819	171.6050492	66.4690212	-0.4354460	-3.5318903	-4.79998542
15	459.67700207	209.8569261	86.1275741	5.0567374	-3.4299180	
17	524.41131096	249.0420760	108.0427421	13.4132897	-2.2272995	

N = nº de quantos

Tabela (5.2) - Oxigênio - Níveis de Energia - 8 quantos - Ali-
-Bodmer - 2 corpos.

ϵ \ n_0	1	2	3	4
11	-3.2499505	1.1900570	10.4833100	13.8371588
13	-3.5318903	2.9402668	16.6273119	23.9150437
15	-3.4299180	6.2774038	25.5270933	38.8192150
17	-2.2272995	11.2941931	36.6655908	57.4466611

Tabela (5.3) - Oxigênio - Est. Fundamental - Pot. do Portilho -
- Coon - 3 corpos.

ϵ \ N	0	2	4	6
3	32.36598142	4.8625078	-4.5602090	-9.2154723
5	87.98779136	22.3947784	-2.4674062	-15.1093931
7	154.2751977	47.1539429	3.4245057	-20.6287731
9	224.8009206	77.0403986	13.0183205	-24.533019
11	295.99387415	110.6186355	26.1665587	-25.8006575
13	365.86612406	146.7768560	42.5463914	-23.9661547
15	433.34393843	184.6392442	61.7342655	-18.9778380
17	497.88912571	223.5203301	83.2775499	-11.0215868

Tabela (5.4) - Oxigênio - Níveis de Energia - 6 quantos - Porti
lho - Coon - 3 corpos.

ϵ \ n_0	1	2	3	4
3	-9.2154723	-3.1832689	-1.3462320	6.8421488
5	-15.1093931	-5.7247550	2.6879177	17.6225276
7	-20.6287731	-6.1429910	11.6769769	32.4988300
9	-24.5330190	-3.7355585	24.3863842	51.5432782
11	-25.8006575	1.6288228	39.5459336	74.8533601
13	-23.9661547	9.7961692	56.2941172	101.0339277
15	-18.9778380	20.4901437	74.1929426	125.3209805
17	-11.0215868	33.3898585	93.0167647	148.3877984

Tabela (5.5) - Oxigênio - Est. Fundamental - Pot. Ogasawara-Hiura
3 corpos.

ϵ \ N	0	2	4	6	8
3	49.69807175	21.5629585	10.8035346	5.9505728	
5	99.44338318	41.0958625	16.5482332	3.6263487	
7	154.1805382	64.8943242	23.9633563	-0.1115684	
9	209.5466418	91.8006588	33.8164655	-3.1478611	
11	263.34743497	120.7621066	46.2095148	-4.2714347	-4.3780778
13	314.56448259	150.9231615	60.9110112	-2.9854343	-4.6167259
15	362.80053655	181.6282539	77.5558384	0.7623613	-4.7365826
17	407.98203392	212.3936665	95.7507015	6.7906568	-4.0828504

Tabela (5.6) - Oxigênio - Níveis de Energia - 8 quantos - Ogasawara
- Miura - 3 corpos.

ϵ \ n_0	1	2	3	4
11	-4.3780778	0.4277836	9.2344732	11.5225863
13	-4.6167259	1.9150139	14.1294583	18.6972531
15	-4.7365826	4.7904288	21.7240152	29.5249386
17	-4.0828504	9.0771487	31.2745528	43.2124833

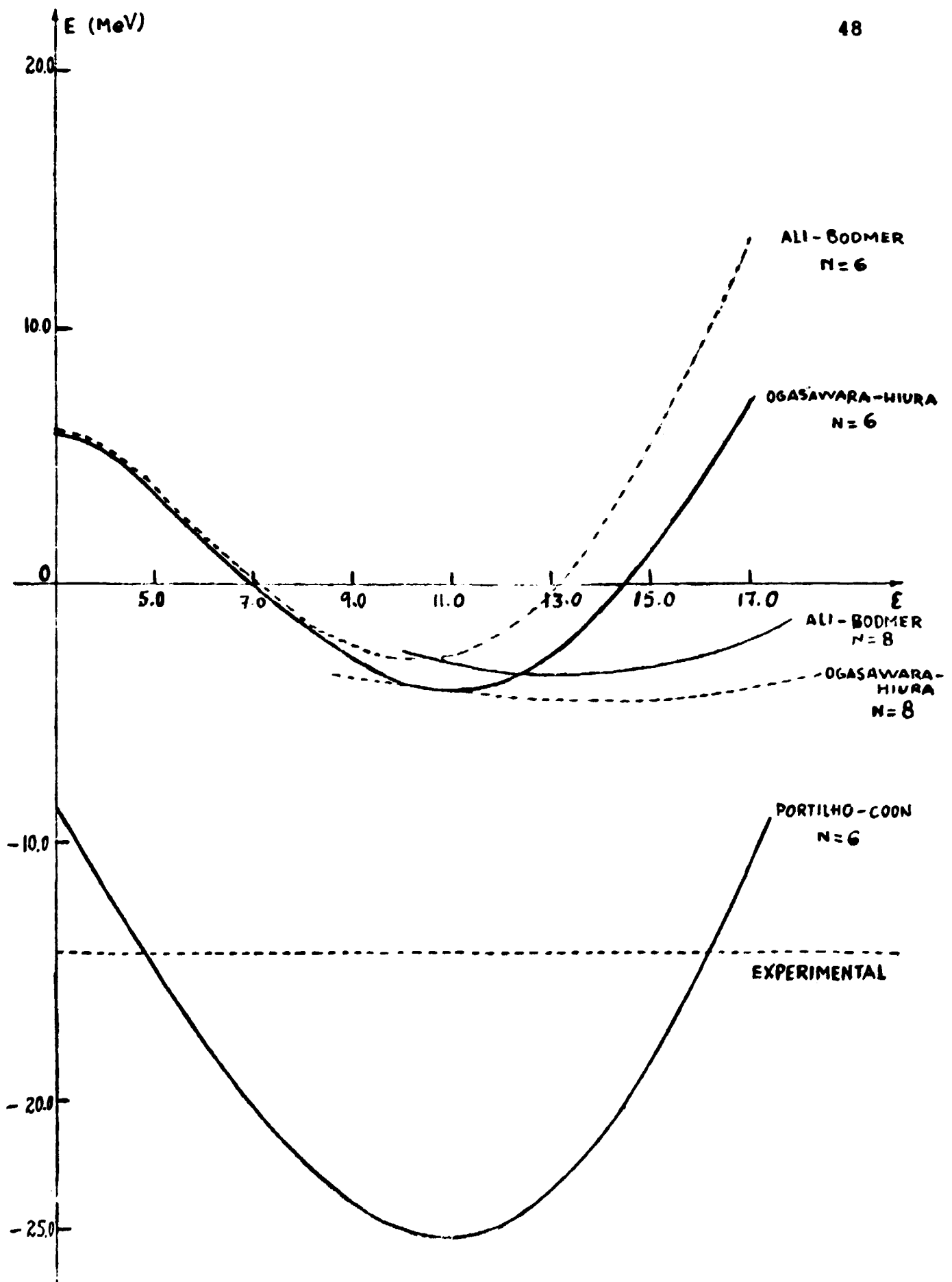


FIG. (5.1)

Tabela (5.7) - Primeiro intervalo de energia em função de ϵ -

$$(O_2^+ - O_1^+) \rightarrow N = 6$$

ϵ	2 Corpos	Portilho-Coon	Ogasawara Hiura	Experimental
3	4.731	6.032	4.720	6.05
5	8.746	9.385	8.705	
7	14.144	14.486	14.011	
9	20.574	20.798	20.295	
11	27.260	27.429	26.814	
13	33.625	33.762	33.028	
15	39.353	39.468	38.651	
17	44.313	44.411	43.573	

Tabela (5.8) - Primeiro intervalo em função de ϵ . ($O_2^+ - O_1^+$) \rightarrow N=8

ϵ	2 Corpos	Ogasawara/Hiura	Experimental
11	4.440	4.806	6.05
13	6.472	6.532	
15	9.707	9.526	
17	13.521	13.160	

Tabela (5.9) - $\Delta_1 = (O_2^+ - O_1^+)$ para o ϵ que dá energia mínima.

Experimental	6.05
Ali - Bodmer $\epsilon = 13$ $N = 8$	6.472
Ogaswara-Hiura $\epsilon = 15$ $N = 8$	9.526
Ali - Bodmer $\epsilon = 11$ $N = 6$	27.260
Ogaswara-Hiura $\epsilon = 11$ $N = 6$	26.814
Portilho -Conn $\epsilon = 11$ $N = 6$	27.429

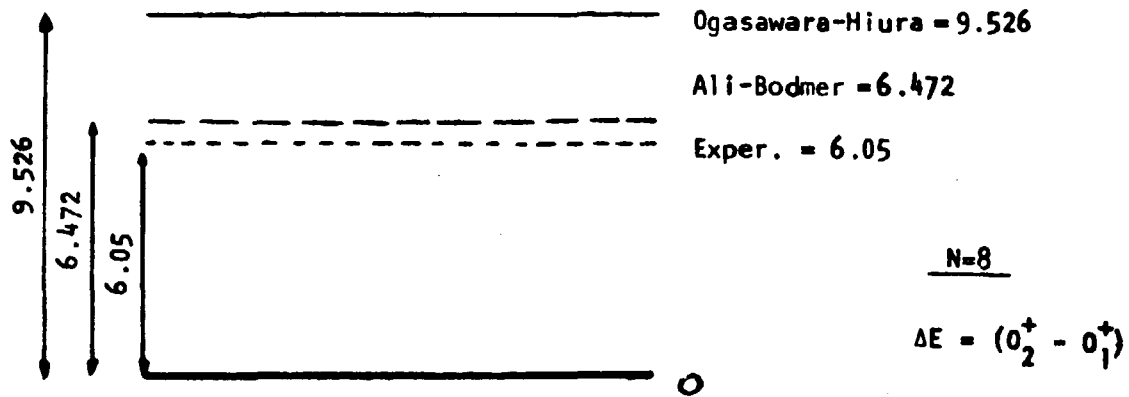


Fig. (5.2)

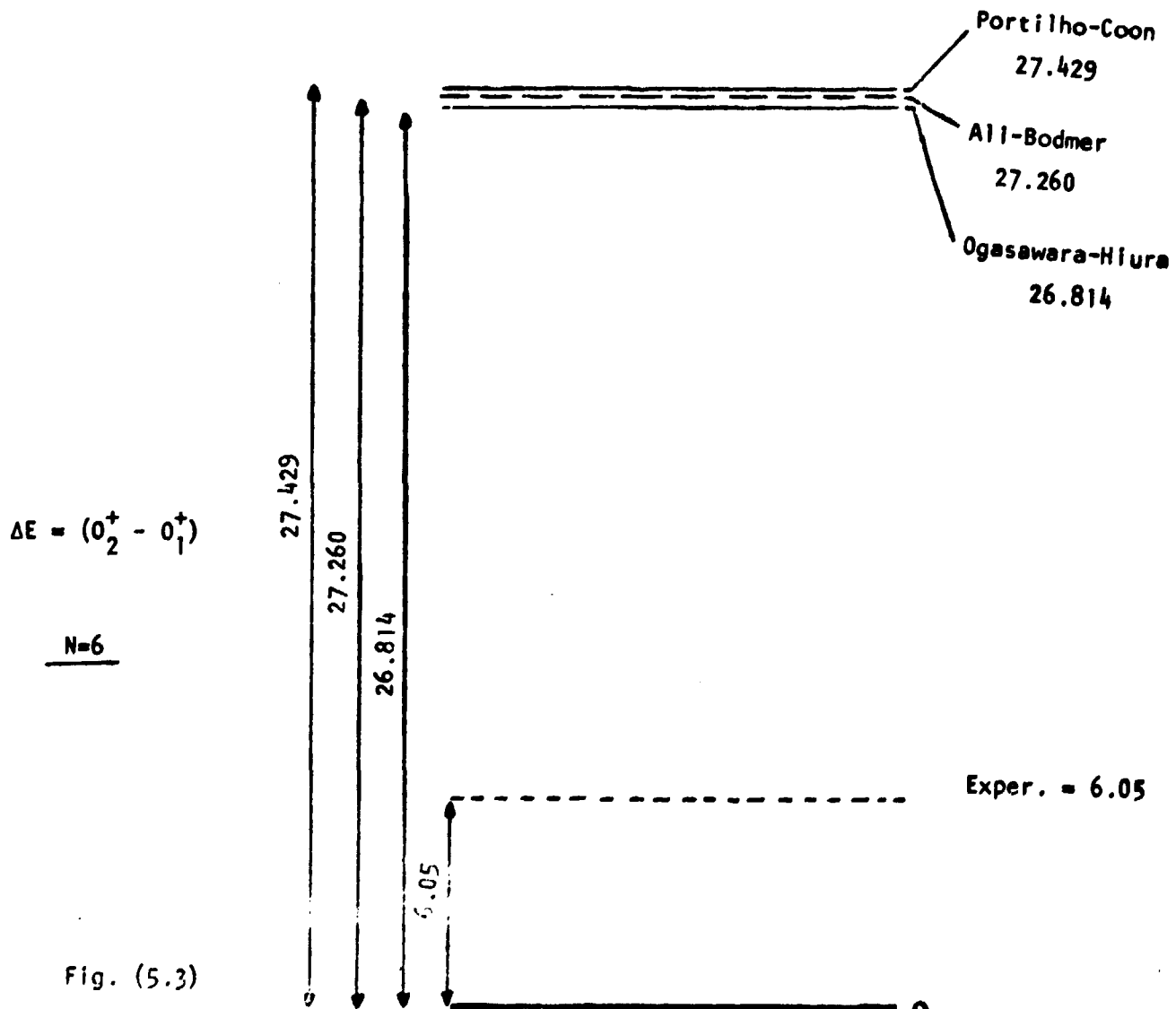


Fig. (5.3)

6. Apêndice - Coeficientes de Moshinsky usuais e generalizados

Partindo de um problema de dois corpos definiremos os coeficientes de Moshinsky ou brashinskets e os coeficientes de Moshinsky generalizados, que são úteis quando estudamos o problema de quatro corpos.

Definimos em (2.9) os estados de duas partículas nas coordenadas de laboratório. É interessante escrevê-los em termos de estados nas coordenadas relativas. Usando o sistema de coordenadas relativas de Jacobi para duas partículas definido em (2.11)-(2.12), e seus respectivos momentos, isto é,

$$\vec{x}_a = \sqrt{1/2} (\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \quad , \quad \vec{p}_a = \sqrt{1/2} (\vec{p}_1 - \vec{p}_2) \quad (\text{A.1})$$

$$\vec{x}_b = \sqrt{1/2} (\vec{x}_1 + \vec{x}_2) \quad , \quad \vec{p}_b = \sqrt{1/2} (\vec{p}_1 + \vec{p}_2) \quad , \quad (\text{A.2})$$

escrevemos os estados em termos de \vec{x}_a e \vec{x}_b . Neste sistema de coordenadas os estados de duas partículas serão dado por

$$\begin{aligned} |n_a l_a, n_b l_b, \Lambda M\rangle &= [\phi_{n_a l_a m_a}(\vec{x}_a) \phi_{n_b l_b m_b}(\vec{x}_b)]_{\Lambda M} = \\ &= [\langle \vec{x}_a | n_a l_a \rangle \cdot \langle \vec{x}_b | n_b l_b \rangle]_{\Lambda M} \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

onde Λ e M são os mesmos que em (2.9), de acordo com a relação

$$\begin{aligned} \vec{l} &= \vec{l}_1 + \vec{l}_2 = (\vec{x}_1 \times \vec{p}_1 + \vec{x}_2 \times \vec{p}_2) \\ &= (\vec{x}_a \times \vec{p}_a + \vec{x}_b \times \vec{p}_b) = \vec{l}_a + \vec{l}_b \quad . \quad (\text{A.4}) \end{aligned}$$

Da mesma forma

$$H(1,2) = \frac{1}{2} (\vec{p}_1^2 + \vec{p}_2^2 + \vec{x}_1^2 + \vec{x}_2^2) = \frac{1}{2} (\vec{p}_a^2 + \vec{p}_b^2 + \vec{x}_a^2 + \vec{x}_b^2) =$$

Podemos então escrever os estados (2.9) nas coordenadas de laboratório como uma combinação linear dos estados (A.3), da seguinte forma

$$|n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \Lambda M\rangle = \sum_{\substack{n_a \ell_a \\ n_b \ell_b}} |n_a \ell_a, n_b \ell_b, \Lambda M\rangle \times \langle n_a \ell_a, n_b \ell_b, \Lambda | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \Lambda \rangle \quad (\text{A.6})$$

onde os coeficientes da expansão são os coeficientes de Mosinsky que estão tabelados em ⁽²⁶⁾. As somas em (A.6) são finitas e restritas por

$$2n_1 + \ell_1 + 2n_2 + \ell_2 = 2n_a + \ell_a + 2n_b + \ell_b, \quad (\text{A.7})$$

devido a equação (A.5). Os números quânticos n_a, ℓ_a, n_b e ℓ_b são inteiros não negativos, sendo que ℓ_a e ℓ_b devem satisfazer a regra de triangularidade para acoplamento de momentos angulares

$$|\ell_a - \ell_b| \leq \Lambda \leq \ell_a + \ell_b \quad (\text{A.8})$$

Pode-se ainda demonstrar que esses coeficientes são independentes do número quântico M ⁽¹⁸⁾ e que possuem algumas relações de simetria ⁽³³⁾. As que nos serão úteis no presente trabalho são as seguintes

$$\begin{aligned} \langle n_a \ell_a, n_b \ell_b, \Lambda | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \Lambda \rangle &= \\ &= (-)^{\ell_b - \Lambda} \langle n_a \ell_a, n_b \ell_b, \Lambda | n_2 \ell_2, n_1 \ell_1, \Lambda \rangle \quad (\text{A.9}) \\ &= (-)^{\ell_1 - \Lambda} \langle n_b \ell_b, n_a \ell_a, \Lambda | n_1 \ell_1, n_2 \ell_2, \Lambda \rangle \end{aligned}$$

Na equação (A-6) quando relacionamos os estados nas coordenadas de laboratório com os estados nas coordenadas de Jacobi, usamos a seguinte transformação

$$\begin{pmatrix} \vec{x}_a \\ \vec{x}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{1/2} & -\sqrt{1/2} \\ \sqrt{1/2} & \sqrt{1/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \pi/4 & -\text{sen } \pi/4 \\ \text{sen } \pi/4 & \cos \pi/4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x}_1 \\ \vec{x}_2 \end{pmatrix}$$

de onde vemos imediatamente que os brashinskets estão associados à uma rotação de $\pi/4$. Queremos agora generalizar para um ângulo β qualquer, ou seja ⁽³⁴⁾,

$$\begin{pmatrix} \hat{x}_a \\ \hat{x}_b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 & -\text{sen } \beta/2 \\ \text{sen } \beta/2 & \cos \beta/2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{x}_1 \\ \hat{x}_2 \end{pmatrix} \quad (\text{A.11})$$

Os estados de duas partículas nas coordenadas (\hat{x}_a, \hat{x}_b) estarão conectados com os estados nas coordenadas (\hat{x}_1, \hat{x}_2) através da expansão

$$|n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda M\rangle = \sum_{\substack{n_a l_a \\ n_b l_b}} |n_a l_a, n_b l_b, \Lambda M\rangle \langle n_a l_a, n_b l_b, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle_\beta \quad (\text{A.12})$$

a qual define os coeficientes

$$\langle n_a l_a, n_b l_b, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle_\beta = (i)^{2n_b + l_b - 2n_2 - l_2} \times \\ \sum_{n_c l_c} \sum_{n_d l_d} \exp[(2n_d + l_d - 2n_c - l_c) i \beta/2] (-)^{l_b + l_2} \times$$

$$\langle n_c l_c, n_d l_d, \Lambda | n_a l_a, n_b l_b, \Lambda \rangle \langle n_c l_c, n_d l_d, \Lambda | n_1 l_1, n_2 l_2, \Lambda \rangle \quad (\text{A.13})$$

que são os parênteses de transformação para rotações por um ângulo arbitrário $\beta/2$, denominados coeficientes de Moshinsky generalizados e foram derivados em ⁽³⁵⁾. Algumas propriedades desses coeficientes são discutidas na referência ⁽³⁶⁾. Pode-se ainda demonstrar que esses coeficientes são reais.

As somas em (A.13) são finitas e restritas pelas propriedades dos brashinskets.

Uma fórmula fechada e bastante conveniente para programas de computação foi recentemente deduzida por Trlifaj ⁽³⁷⁾.

7. Referências

1. G.Gamov, Z.Physik 52 (1928) 510.
 2. D.R. Harrington, Phys. Rev. 147 (1966) 685.
 3. C.C.H. Leung e S.C.Park, Phys. Rev. 187 (1969) 1239.
 4. Prog. Theor. Phys. Supl. 52 - (1972).
 5. G.F. Bertsch e W. Bertozzi, Nucl. Phys. A165 (1971) 199.
 6. A. Osman, Phys. Rev. C4 (1972) 302.
 7. G. Fäldt e L. Gislén, Nucl. Phys. A254 (1975) 341.
 8. L.R. Hafstad e E. Teller, Phys. Rev. 54 (1938) 681.
 9. S. Ali e A.R. Bodmer, Nucl. Phys. 80 (1966) 99.
 10. R.M.Mendez-Moreno, M. Moreno e T.H.Seligman, Nucl. Phys. A221 (1974) 381.
 11. V.C.Aguilera-Navarro, O.Portilho e R. Yamaoka, Rev.Bras.Fis. 4 (1974) 107.
 12. V.C.Aguilera-Navarro e O. Portilho, Ann.Phys.(N.Y), 107 (1977) 126.
 13. R.Tamagaki e Y. Fujiwara, Prog.Theor.Phys.Supl. 61 (1977) 229.
 14. L.M.Delves e M.A.Hennell, Nucl.Phys. A168 (1971) 347.
 15. J.Zofka e M.Sotona, Czech.J.Phys. B24 (1974) 1250.
 16. O. Portilho e S.A.Coon, Z.Physik A290 (1979) 93.
 17. H.Ogasawara e J.Hiura, Prog.Theor.Phys. 59 (1978) 655.
 18. M.Moshinsky: "The Harmonic Oscillator in Modern Physics: From Atoms to Quarks", Gordon and Breach, New York, 1969.
 19. M.Moshinsky, Nucl.Phys. 13 (1959) 104.
 20. P.Kramer e M.Moshinsky, "Group Theory of Harmonic Oscillator and Nuclear Structure", em "Group Theory and Applications" (E.M.Loeb1, Ed.), Academic Press, N.Y., 1968, pg.384.
 21. D.M.Brink e G.R.Satchler: "Angular Momentum", Clarendon Press, Oxford, 1968 - 2a. edição, pg.41.
 22. Ref.21, pg. 142.
 23. V.C. Aguilera-Navarro, Tese de Doutorado, Universidad Nacional Autonoma do México, 1969, pg. 47.
 24. Ref. 23, pg.34.
 25. V.C.Aguilera-Navarro, Rev.Mex.Fis. 20 (1971) 31.
 26. T.A. Brody e M. Moshinsky, "Tables of Transformation Brackets", Gordon e Breach, New York, 1967.
 27. I. Talmi, Helv. Phys. Acta 25 (1952) 185.
 28. Ref. 21, pg. 151.
-

30. M. Abramowitz e I.A. Stegun, "Handbook of Mathematical Functions", Dover Public., N.Y. (1965), pg. 486, nº 11.4.28.
31. F. Ajzenberg-Selove e T.Lauritsen, Nucl.Phys.11 (1959) 1.
32. J.N.Maki, tese de mestrado, IFT, São Paulo, 1979.
33. M. Moshinsky e T.A. Brody, Rev.Mex. Fis. 9 (1960) 181 e Ref. 26.
34. A.Gal, Ann. Phys. (N.Y.), 49 (1968) 341.
35. Ref. 18, pg. 42.
36. V.C.Aguilera-Navarro, T.A.Brody e J.Flores, Rev.Mex.Fis.19 (1970) 303.
37. L. Trlifaj, Phys. Rev. 5C (1972) 1534.

