

Densidades de probabilidad en núcleos de tres cuerpos

Teodoro Jiménez Lepe

Tutores:

Jesús Casal Berbel

José Antonio Lay Valera

Trabajo de Fin de Grado

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Mayo 2022



Índice

1. Introducción	4
1.1. Núcleos halo y sistemas Borromeos	4
1.2. Objetivos	6
2. Metodología y desarrollo de contenidos	6
2.1. Sistemas de coordenadas de Jacobi	6
2.2. Hamiltoniano de un sistema de tres cuerpos	9
2.3. Autoestados del hamiltoniano	10
2.3.1. Parte angular y de espín	12
2.3.2. Parte hiperradial	19
2.4. Densidades de probabilidad	24
2.4.1. Densidades de probabilidad en coordenadas hiperesféricas	24
2.4.2. Densidades de probabilidad en coordenadas de Jacobi	27
2.5. Observables	28
2.5.1. Contenido de dineutrón y <i>cigar-like</i>	28
2.5.2. Radios cuadráticos medios	29
2.5.3. Comparación con el deuterón (^2H)	30
3. Resultados	32
3.1. Estado fundamental de ^6He (0^+)	33

3.2. Estado fundamental de ^{11}Li (0^+)	40
4. Resumen y conclusiones	46
Bibliografía	48

1. Introducción

En este trabajo vamos a estudiar algunas propiedades de núcleos exóticos que admiten una descripción de tres cuerpos. En particular, nos centraremos en sus densidades de probabilidad. En esta sección se introduce el problema a tratar y se resumen los objetivos del trabajo.

1.1. Núcleos halo y sistemas Borromeos

Los núcleos atómicos son sistemas constituidos por A nucleones: Z protones y N neutrones. Según su Z y N , a un núcleo se le puede asignar una posición en la carta de Segrè. Los más de tres mil núcleos conocidos que la componen están confinados entre las líneas de evaporación de neutrones y protones. No pueden existir núcleos ligados más allá de estas. Sólo algunos cientos tienen vidas medias y energías de ligadura elevadas, los cuales se consideran estables y definen el llamado valle de estabilidad, que es una franja central alejada de ambas líneas de evaporación. El resto de núcleos son inestables y se suelen denominar exóticos. En la figura 1 se muestra la carta de Segrè para $Z \leq 10$ y $N \leq 16$ [1].

Los núcleos exóticos en la zona de núcleos ligeros pueden presentar uno o más neutrones (o protones) débilmente ligados y un subnúcleo o estructura mucho más ligada que se denomina *core*. Los nucleones débilmente ligados, llamados nucleones de valencia, presentan funciones de onda con largas colas, lo que implica una probabilidad de presencia mayor de lo habitual en zonas alejadas del *core*. En ese caso se habla de núcleos halo, llamados así por el tenue halo de materia que representa su peculiar distribución de densidad [2, 3]. Para tener un halo apreciable, los nucleones tienen que ocupar estados de bajo momento angular, cuyas funciones de onda son más extensas.

Los núcleos halo presentan propiedades cualitativa y cuantitativamente diferentes a los núcleos estables, llegando a cuestionar los enfoques convencionales del Modelo de Capas y Hartree-Fock [4]. Algunas de estas propiedades son: gran sección eficaz de interacción [1, 5], nuevos números mágicos [6] y la extremadamente pequeña energía de separación de uno o dos nucleones. Mientras que cerca del valle de estabilidad esta es de 6 – 8 MeV, en

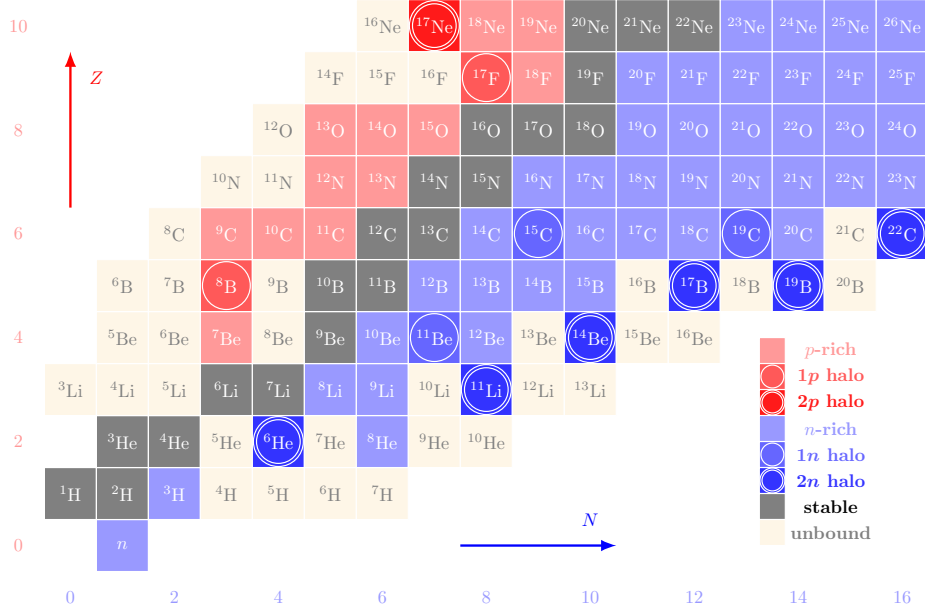


Figura 1: Carta de Segrè para $Z \leq 10$ y $N \leq 16$. Se muestran núcleos estables (gris), no ligados (amarillo) y ricos en protones (rojo) y neutrones (azules). Se marcan con uno o dos anillos los núcleos halo de uno o dos nucleones respectivamente [1].

estos núcleos se pueden encontrar valores inferiores a 1 MeV [2]. Adicionalmente, los núcleos halo suelen presentar una probabilidad de excitación dipolar eléctrica al continuo anormalmente grande [7, 8].

Ejemplos de núcleos halo ligeros son ^{11}Be , que tiene un neutrón débilmente ligado, y ^6He y ^{11}Li , que cuentan con dos de ellos. Los núcleos halo de dos neutrones, gracias a su estructura $core + n + n$, pueden modelarse como un sistema Borromeo de tres cuerpos, evitando abordar el problema más complejo de A nucleones. Un sistema Borromeo es un sistema ligado de tres cuerpos cuyos subsistemas binarios son no ligados [1, 4]. Cabe mencionar que no todos los núcleos Borromeos han de ser halo, débilmente ligados y/o exóticos. Ejemplos de ello son ^{12}C ($\alpha + \alpha + \alpha$) y ^9Be ($\alpha + \alpha + n$), que son núcleos estables.

El núcleo ^{11}Li fue el primer caso observado de núcleo con un halo asociado neutrones débilmente ligados [2]. Tanto ^6He ($\alpha + n + n$) como ^{11}Li ($^9\text{Li} + n + n$) son ejemplos claros de núcleos halo de dos neutrones y han sido modelados como sistemas de tres cuerpos durante décadas. Adicionalmente, se trata de los núcleos halo más estudiados experimentalmente [9]. Por ello, constituyen ejemplos ideales para familiarizarse con el formalismo de los armónicos hipersféricos (método que se introducirá en la sección 2)

y con las herramientas utilizadas en sistemas cuánticos de tres cuerpos en general. Para simplificar el trabajo, se supondrá que el *core* de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$ es inerte. En el caso de ${}^6\text{He}$, esta aproximación es válida ya que la partícula alfa tiene una energía de excitación muy elevada (≈ 20 MeV). Para el ${}^{11}\text{Li}$, en principio esta simplificación no está tan justificada, pero sigue siendo razonable por la escala de energías: sus dos neutrones de valencia tienen una energía de separación inferior a 0,5 MeV, y para excitar el *core* se necesitarían aproximadamente 2,7 MeV[10, 11].

1.2. Objetivos

Este trabajo tiene dos partes. La primera consiste en familiarizarse con el formalismo de armónicos hiperesféricos para la solución de la Ecuación de Schrödinger en sistemas de tres cuerpos y su aplicación a núcleos atómicos. Se busca utilizar procedimientos análogos a los conocidos en Mecánica Cuántica de sistemas de dos cuerpos para obtener densidades de probabilidad en sistemas de tres cuerpos. En la segunda parte, más práctica, se pretende estudiar y comparar densidades de probabilidad y observables de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$ a partir funciones de onda dadas. Para ello, se plantea generar programas de *Matlab*[®] para tratar con las densidades de probabilidad asociadas a diferentes coordenadas. Dado que los escogidos son núcleos halo, se espera que estas densidades de probabilidad concuerden con funciones de onda extensas. Veremos que en estos núcleos la función de onda presenta un máximo asociado a distancias pequeñas entre los neutrones de valencia, que llamamos dineutrón, y que podemos cuantificar y comparar.

2. Metodología y desarrollo de contenidos

2.1. Sistemas de coordenadas de Jacobi

Para abordar un problema de tres cuerpos en un espacio tridimensional, se puede comenzar planteando un sistema de nueve coordenadas: tres para cada una de las tres partículas estudiadas; una por cada grado de libertad del conjunto. Sin embargo, tres grados de

libertad pueden asociarse al movimiento del centro de masas, que no nos interesa en este caso. Se enfoca el problema, entonces, con seis coordenadas espaciales.

En Mecánica Cuántica se utiliza el sistema de coordenadas de Jacobi para describir dichos seis grados de libertad restantes. En la figura 2, se observa que el sistema de coordenadas de Jacobi \underline{i} se caracteriza por describir la posición relativa de los cuerpos j y k a través de \mathbf{r}_{x_i} , y la posición del cuerpo i con respecto al centro de masas de j y k a través de \mathbf{r}_{y_i} . Las posiciones de los tres cuerpos con respecto a un origen de coordenadas común cualquiera son $\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j$ y \mathbf{r}_k , siendo i, j, k una permutación par de 1, 2, 3. Estas están relacionadas con las posiciones relativas a través de las siguientes expresiones:

$$\mathbf{r}_{x_i} = (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k), \quad (1a)$$

$$\mathbf{r}_{y_i} = \left(\mathbf{r}_i - \frac{m_j \mathbf{r}_j + m_k \mathbf{r}_k}{m_j + m_k} \right). \quad (1b)$$

A partir de estas definiciones, se pueden introducir las coordenadas de Jacobi. Como se ha dicho anteriormente, se trata de dos sets de coordenadas esféricas: $\{\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i\} \equiv \{x_i, \theta_{x_i}, \phi_{x_i}, y_i, \theta_{y_i}, \phi_{y_i}\}$. Puede observarse un paralelismo con las coordenadas esféricas habituales, pues las coordenadas $\theta_{x_i}, \phi_{x_i}, \theta_{y_i}, \phi_{y_i}$ se corresponden con los ángulos polares y azimutales convencionales referidos a los ejes a los que pertenecen \mathbf{r}_{x_i} y \mathbf{r}_{y_i} respectivamente. Sin embargo, x_i e y_i no son las distancias relativas r_{x_i} y r_{y_i} . Están relacionadas con ellas según

$$x_i = r_{x_i} \sqrt{\frac{a_{x_i}}{m}}, \quad (2a)$$

$$y_i = r_{y_i} \sqrt{\frac{a_{y_i}}{m}}, \quad (2b)$$

donde m suele tomarse como con la unidad atómica de masas y a_{x_i} y a_{y_i} son las masas

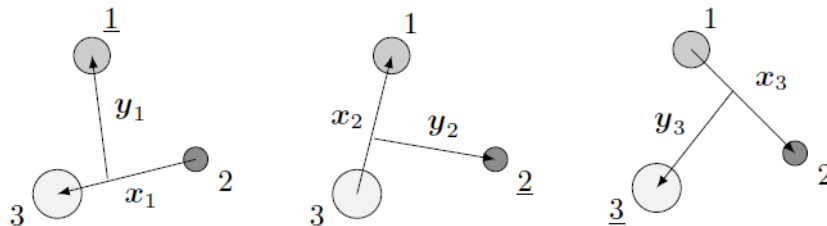


Figura 2: Sistemas de coordenadas de Jacobi $\underline{1}$, $\underline{2}$ y $\underline{3}$ [1].

reducidas de los subsistemas (constantes de escala):

$$a_{x_i} = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k}, \quad (3a)$$

$$a_{y_i} = \frac{m_i(m_j + m_k)}{m_i + m_j + m_k}. \quad (3b)$$

A partir de las coordenadas de Jacobi se definen nuevas coordenadas que permiten expresar el hamiltoniano y las funciones de onda del sistema de una forma conveniente. Se trata de las coordenadas hiperesféricas: $\{\rho, \alpha_i, \theta_{x_i}, \phi_{x_i}, \theta_{y_i}, \phi_{y_i}\}$, que conservan las cuatro coordenadas angulares del sistema de Jacobi, pero convierten las dos coordenadas radiales, x_i e y_i en una coordenada hiperradial, ρ (hiperradio), y otra angular, α_i (hiperángulo). Estas son las ecuaciones que describen la transformación:

$$\rho^2 = x_i^2 + y_i^2, \quad (4a)$$

$$\tan \alpha_i = \frac{x_i}{y_i}, \quad (4b)$$

$$x_i = \rho \sin \alpha_i, \quad (4c)$$

$$y_i = \rho \cos \alpha_i. \quad (4d)$$

Cabe aclarar que $\rho \in [0, +\infty)$ y no depende del sistema de Jacobi, mientras que $\alpha_i \in (0, \pi/2)$. Se define un conjunto Ω_i para englobar todas las coordenadas angulares: $\Omega_i \equiv \{\alpha_i, \theta_{x_i}, \phi_{x_i}, \theta_{y_i}, \phi_{y_i}\}$. Es conveniente definir la forma del elemento de volumen, que será necesario para integrar posteriormente:

$$\begin{aligned} d^3 \mathbf{x}_i d^3 \mathbf{y}_i &\equiv x_i^2 y_i^2 \sin \theta_{x_i} \sin \theta_{y_i} dx_i dy_i d\theta_{x_i} d\theta_{y_i} d\phi_{x_i} d\phi_{y_i} \equiv \\ &\equiv \rho^5 (\sin \alpha_i)^2 (\cos \alpha_i)^2 \sin \theta_{x_i} \sin \theta_{y_i} d\rho d\alpha_i d\theta_{x_i} d\theta_{y_i} d\phi_{x_i} d\phi_{y_i} \equiv \\ &\equiv \rho^5 (\sin \alpha_i)^2 (\cos \alpha_i)^2 d\rho d\alpha_i d\hat{x}_i d\hat{y}_i \equiv \rho^5 (\sin \alpha_i)^2 (\cos \alpha_i)^2 d\rho d\Omega_i. \end{aligned} \quad (5)$$

En la expresión anterior se han usado las ecuaciones (4) y la expresión que relaciona $dx_i dy_i$ con $d\rho d\alpha_i$ a través del Jacobiano de la transformación:

$$dx_i dy_i = \begin{vmatrix} \frac{\partial y_i}{\partial \rho} & \frac{\partial y_i}{\partial \alpha_i} \\ \frac{\partial x_i}{\partial \rho} & \frac{\partial x_i}{\partial \alpha_i} \end{vmatrix} d\rho d\alpha_i = \rho d\rho d\alpha_i. \quad (6)$$

Análogamente, a partir de las ecuaciones (2), se pueden relacionar $dx_i dy_i$ y $dr_{x_i} dr_{y_i}$:

$$dx_i dy_i = \frac{\sqrt{a_{x_i} a_{y_i}}}{m} dr_{x_i} dr_{y_i}. \quad (7)$$

Los sistemas estudiados en este trabajo, ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$, son del tipo *core* + n + n , por lo que es útil utilizar un sistema de coordenadas de Jacobi en el que \mathbf{r}_x conecte a los neutrones

entre sí, y \mathbf{r}_y , al centro de masas del subsistema de dos neutrones con el *core*. Por este motivo, durante el resto de la memoria se utilizará el sistema de Jacobi 3, y se omitirán los subíndices que lo distinguen de los sistemas 1 y 2.

2.2. Hamiltoniano de un sistema de tres cuerpos

Para analizar las densidades de probabilidad y los observables de interés de los sistemas estudiados, es necesario calcular las funciones de onda resolviendo la ecuación de Schrödinger. Por ello, es necesario obtener los autoestados y los autovalores del hamiltoniano del sistema. Un desarrollo extenso sobre sistemas de tres cuerpos en coordenadas hipersféricas puede encontrarse en las referencias [1] y [12]. En coordenadas de Jacobi, con \hat{T} operador energía cinética y \hat{V} operador potencial, el hamiltoniano se expresa como:

$$\hat{H}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \hat{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \hat{V}(\mathbf{x}, \mathbf{y}). \quad (8)$$

El operador energía cinética se puede expresar como una suma de las energías cinéticas asociadas a cada uno de los sets de coordenadas esféricas de Jacobi, \mathbf{x} e \mathbf{y} [1]:

$$\hat{T}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \hat{t}_x(\mathbf{x}) + \hat{t}_y(\mathbf{y}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{1}{x} \frac{d^2}{dx^2} x - \frac{\hat{l}_x^2}{x^2} \right) + \left(\frac{1}{y} \frac{d^2}{dy^2} y - \frac{\hat{l}_y^2}{y^2} \right) \right], \quad (9)$$

donde \hat{l}_x^2 y \hat{l}_y^2 son los operadores momentos angular orbital asociados a $\{\theta_x, \phi_x\}$ y $\{\theta_y, \phi_y\}$ respectivamente. Nótese que con la presente definición, los autovalores de \hat{l}_x^2 y \hat{l}_y^2 no incluyen \hbar^2 . Consecuentemente tampoco los autovalores de sus proyecciones incluirán \hbar .

Se puede expresar el operador energía cinética en coordenadas hipersféricas mediante las ecuaciones (4) aplicando la regla de la cadena para funciones multivaluadas [1]:

$$\hat{T}(\rho, \Omega) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} + \frac{1}{\rho^2} 4 \cot(2\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} - \frac{\hat{l}_x^2}{\rho^2 \sin^2 \alpha} - \frac{\hat{l}_y^2}{\rho^2 \cos^2 \alpha} \right]. \quad (10)$$

Se introduce el operador hipermomento, $\hat{K}(\Omega)$, cuyo cuadrado viene dado por

$$\hat{K}^2(\Omega) = -\frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 4 \cot(2\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} + \frac{\hat{l}_x^2}{\sin^2 \alpha} + \frac{\hat{l}_y^2}{\cos^2 \alpha}, \quad (11)$$

y permite reescribir el operador energía potencial de una forma más compacta:

$$\hat{T}(\rho, \Omega) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{5}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \hat{K}^2(\Omega) \right]. \quad (12)$$

Es interesante reescribir los términos $\hat{t}_x(\mathbf{x})$ y $\hat{t}_y(\mathbf{y})$ para observar el paralelismo que existe con la ecuación (12):

$$\hat{t}_x(\mathbf{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{2}{x} \frac{\partial}{\partial x} - \frac{\hat{l}_x^2}{x^2} \right], \quad (13a)$$

$$\hat{t}_y(\mathbf{y}) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{2}{y} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\hat{l}_y^2}{y^2} \right]. \quad (13b)$$

El operador potencial se expresa a partir de términos a dos cuerpos (correspondientes a cada uno de los tres subsistemas binarios) y un término a tres cuerpos:

$$\hat{V}(\rho, \Omega) = \hat{V}_{12} + \hat{V}_{23} + \hat{V}_{13} + \hat{V}_{3b}. \quad (14)$$

Los tres términos binarios se ajustan para reproducir los datos experimentales disponibles de los subsistemas a los que se refieren, mientras que el término a tres cuerpos se puede ajustar a alguna propiedad del sistema de tres cuerpos, como la energía de ligadura del sistema [1].

Cada uno de los potenciales binarios se expresa como una suma de términos que modelan la interacción entre los dos cuerpos implicados. Además del término central, que depende exclusivamente de la distancia entre las dos partículas del subsistema, las interacciones pueden incluir términos adicionales como el espín-órbita, espín-espín, o el operador tensorial estándar en el caso de la interacción nucleón-nucleón.

2.3. Autoestados del hamiltoniano

Una autofunción del hamiltoniano de un sistema tres cuerpos, asociada al autovalor $\varepsilon_{\nu j}$ (donde ν indica el nivel energético, siendo $\nu = 0$ el estado fundamental), con momento angular total j y proyección μ , en coordenadas hiperesféricas, puede escribirse de la siguiente forma [1]:

$$\psi^{\nu j \mu}(\rho, \Omega, \sigma) = \rho^{-5/2} \sum_{\beta} \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) \mathcal{Y}_{\beta}^{j \mu}(\Omega, \sigma). \quad (15)$$

Conviene aclarar la forma de las funciones implicadas en notación de Dirac:

$$|\nu; j\mu\rangle \rightarrow \psi^{\nu j\mu}(\rho, \Omega, \sigma), \quad (16a)$$

$$|\nu\beta; j\mu\rangle \rightarrow \rho^{-5/2} \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) \mathcal{Y}_{\beta}^{j\mu}(\Omega, \sigma), \quad (16b)$$

$$|\nu\beta; j\rangle \rightarrow \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho), \quad (16c)$$

$$|\beta; j\mu\rangle \rightarrow \mathcal{Y}_{\beta}^{j\mu}(\Omega, \sigma). \quad (16d)$$

Las coordenadas de espín son representadas por σ . Expresamos la función de onda como un sumatorio de términos que difieren en β porque para cada momento angular total j estudiado, puede existir más de una combinación de números cuánticos compatible. A esta combinación de números cuánticos se le llama canal: $\beta = \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\}$. El número cuántico l es el resultado de acoplar l_x y l_y , mientras que S_x es el resultado de acoplar s_1 y s_2 , que son los espines de las partículas 1 y 2. Acoplar l y S_x da como resultado j_{ab} . Por último, K es un número cuántico relacionado con los autovalores del operador hipermomento, cuyo cuadrado se define en la ecuación (11).

Toda la parte angular y de espín de la función de onda total está incluida en funciones de la forma

$$\mathcal{Y}_{\beta}^{j\mu}(\Omega, \sigma) = \left\{ \left[\Upsilon_{Kl}^{l_x l_y}(\Omega) \otimes \phi_{S_x}(\sigma_x) \right]_{j_{ab}} \otimes \kappa_{S_3}(\sigma_3) \right\}_{j\mu}. \quad (17)$$

Las funciones $\Upsilon_{Kl m_l}^{l_x l_y}(\Omega)$ son los armónicos hiperesféricos, análogos a los armónicos esféricos en el caso de seis dimensiones espaciales y calculables analíticamente. Estas funciones son autoestados del operador hipermomento al cuadrado, como se verá en el siguiente apartado. La dependencia con el espín del subsistema neutrón-neutrón (cuerpos 1 y 2), caracterizado por la coordenada x , viene dada por $\phi_{S_x}(\sigma_x)$. Por último, $\kappa_{S_3}(\sigma_3)$ almacena la dependencia con el espín del *core* (partícula 3).

La parte hiperradial de la función de onda viene dada por las funciones $\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho)$ y el factor global $\rho^{-5/2}$. Estas funciones, a diferencia de los armónicos hiperesféricos, requieren de métodos numéricos para obtenerse.

2.3.1. Parte angular y de espín

Los armónicos hiperesféricos contienen toda la dependencia angular de la función de onda. Pueden expresarse como el producto directo de la parte hiperangular de la función de onda, $\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)$, y los armónicos esféricos, $Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x})$ y $Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y})$, acoplados a l y m_l :

$$\Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega) = \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) \left[Y_{l_x}(\hat{x}) \otimes Y_{l_y}(\hat{y}) \right]_{lm_l}. \quad (18)$$

Las ecuaciones (17) y (18) esbozan el esquema de acoplamiento de momentos angulares que se lleva a cabo en este sistema, pero no lo describen en su totalidad. Es conveniente analizar los momentos angulares implicados y sus acoplamientos en detalle. Los momentos angulares de partida, antes de realizar ningún acoplamiento, son \mathbf{S}_1 , \mathbf{S}_2 , \mathbf{S}_3 (momentos angulares de espín asociados a cada uno de los tres cuerpos), \mathbf{l}_x y \mathbf{l}_y (momentos angulares orbitales asociados a \mathbf{x} e \mathbf{y}).

El número cuántico S_x está asociado a los autovectores del operador \mathbf{S}_x , que es la suma de \mathbf{S}_1 y \mathbf{S}_2 , momentos angulares de espín para las partículas 1 y 2:

$$\mathbf{S}_x = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 \equiv \mathbf{S}_1 \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{S}_2. \quad (19a)$$

$$|\sigma_x\rangle \equiv |\sigma_1, \sigma_2\rangle = |\sigma_1\rangle \otimes |\sigma_2\rangle. \quad (19b)$$

El operador \mathbf{S}_x actúa sobre el subespacio asociado a las coordenadas de espín $\sigma_x \equiv \{\sigma_1, \sigma_2\}$, que surge del producto directo de los subespacios asociados a σ_1 y σ_2 por separado. Para generar este subespacio, se puede usar la base de autovectores comunes del conjunto completo de observables que conmutan (CCOC) $\{\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_{1_z}, \hat{S}_{2_z}\}$:

$$|s_1 s_2; m_1 m_2\rangle \equiv |s_1 m_1\rangle \otimes |s_2 m_2\rangle, \quad (20)$$

con $s_i = 1/2$ y $m_i \in \{-1/2, 1/2\}$, ($i = 1, 2$). Sin embargo, se usará la base acoplada, formada por autovectores comunes del CCOC $\{\hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_x^2, \hat{S}_{x_z}\}$, que cumple:

$$\hat{S}_1^2 |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle = s_1(s_1 + 1) |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle, \quad (21a)$$

$$\hat{S}_2^2 |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle = s_2(s_2 + 1) |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle, \quad (21b)$$

$$\hat{S}_x^2 |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle = S_x(S_x + 1) |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle, \quad (21c)$$

$$S_{x_z} |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle = m_x |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle, \quad (21d)$$

donde los números cuánticos asociados al momento angular total (S_x) y su proyección en z (m_x), están sujetos a las siguientes condiciones:

$$|s_1 - s_2| \leq S_x \leq (s_1 + s_2), \quad (22a)$$

$$m_{S_x} = m_1 + m_2. \quad (22b)$$

Las dos bases presentadas están relacionadas a través de la siguiente expresión:

$$|s_1 s_2; S_x m_x\rangle = \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle s_1 s_2; m_1 m_2 | s_1 s_2; S_x m_x \rangle |s_1 s_2; m_1 m_2\rangle, \quad (23)$$

donde $\langle s_1 s_2; m_1 m_2 | s_1 s_2; S_x m_x \rangle$ son coeficientes de Clebsch-Gordan. Usando la representación de coordenadas de espín, obtenemos la función que aparece en la ecuación (17) como parte de las funciones $\mathcal{Y}_\beta^{l_x l_y}(\Omega, \sigma)$:

$$\phi_{S_x}(\sigma_x) = \langle \sigma_x | s_1 s_2; S_x m_x \rangle. \quad (24)$$

Trabajando en el subespacio de coordenadas esféricas angulares, $\{\theta_x, \phi_x, \theta_y, \phi_y\}$, que equivale a $\{\hat{x}, \hat{y}\}$, se define \mathbf{l} , fruto del acoplamiento de \mathbf{l}_x y \mathbf{l}_y :

$$\mathbf{l} = \mathbf{l}_x + \mathbf{l}_y \equiv \mathbf{l}_x \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{l}_y, \quad (25a)$$

$$|\theta_x, \phi_x, \theta_y, \phi_y\rangle = |\theta_x, \phi_x\rangle \otimes |\theta_y, \phi_y\rangle \equiv |\hat{x}\rangle \otimes |\hat{y}\rangle = |\hat{x}, \hat{y}\rangle. \quad (25b)$$

Para generar este subespacio, se puede usar una base de autovectores comunes al CCOC $\{\hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}_{x_z}, \hat{l}_{y_z}\}$, que cumple las siguientes propiedades:

$$\hat{l}_x^2 |l_x l_y; m_x m_y\rangle = l_x(l_x + 1) |l_x l_y; m_x m_y\rangle, \quad (26a)$$

$$\hat{l}_y^2 |l_x l_y; m_x m_y\rangle = l_y(l_y + 1) |l_x l_y; m_x m_y\rangle, \quad (26b)$$

$$l_{x_z} |l_x l_y; m_x m_y\rangle = m_x |l_x l_y; m_x m_y\rangle, \quad (26c)$$

$$l_{y_z} |l_x l_y; m_x m_y\rangle = m_y |l_x l_y; m_x m_y\rangle, \quad (26d)$$

con $l_i \in \mathbb{N}_0$ y $m_i = 0, \pm 1, \dots, \pm l_i$ para $i = x, y$. Es conveniente recordar que los elementos de las bases de autovectores comunes de $\{\hat{l}_x^2, \hat{l}_{x_z}\}$ y $\{\hat{l}_y^2, \hat{l}_{y_z}\}$ por separado son los armónicos esféricos asociados a \mathbf{x} e \mathbf{y} , luego:

$$\langle \hat{x}, \hat{y} | l_x l_y; m_x m_y \rangle = Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}). \quad (27)$$

Estos aparecen en la ecuación (18), en la que se aclara que se utilizará la base acoplada, es decir, de autovectores del CCOC $\{\hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}^2, \hat{l}_z\}$. Cumple las siguientes propiedades:

$$\hat{l}_x^2 |l_x l_y; l m_l\rangle = l_x(l_x + 1) |l_x l_y; l m_l\rangle, \quad (28a)$$

$$\hat{l}_y^2 |l_x l_y; l m_l\rangle = l_y(l_y + 1) |l_x l_y; l m_l\rangle, \quad (28b)$$

$$\hat{l}^2 |l_x l_y; l m_l\rangle = l(l + 1) |l_x l_y; l m_l\rangle, \quad (28c)$$

$$l_z |l_x l_y; l m_l\rangle = m_l |l_x l_y; l m_l\rangle, \quad (28d)$$

donde los números cuánticos l y su proyección, m_l , han de cumplir

$$|l_x - l_y| \leq l \leq (l_x + l_y), \quad (29a)$$

$$m_l = m_x + m_y. \quad (29b)$$

Las autofunciones de la base acoplada que genera el subespacio $\{\hat{x}, \hat{y}\}$, pueden expresarse utilizando la representación de posiciones:

$$\left[Y_{l_x}(\hat{x}) \otimes Y_{l_y}(\hat{y}) \right]_{l m_l} = \langle \hat{x}, \hat{y} | l_x l_y; l m_l \rangle. \quad (30)$$

Además, se pueden expresar como una combinación lineal de la base sin acoplar a través de los coeficientes de Clebsch-Gordan:

$$|l_x l_y; l m_l\rangle = \sum_{m_x} \sum_{m_y} \langle l_x l_y; m_x m_y | l_x l_y; l m_l \rangle |l_x l_y; m_x m_y\rangle, \quad (31)$$

Conviene recordar que los armónicos esféricos cumplen las siguientes condiciones de ortogonalidad ($i = x, y$):

$$\int_0^{2\pi} d\phi_i \int_0^\pi \sin \theta_i d\theta_i [Y_{l_i}^{m_i}(\theta_i, \phi_i)]^* Y_{l_i}^{m_i'}(\theta_i, \phi_i) = \delta_{l_i l_i'} \delta_{m_i m_i'}. \quad (32)$$

Por tanto, las funciones fruto del acoplamiento de los armónicos esféricos asociados a \mathbf{x} e \mathbf{y} cumplen:

$$\int d\hat{x} \int d\hat{y} \left[Y_{l_x}(\hat{x}) \otimes Y_{l_y}(\hat{y}) \right]_{l m_l}^* \left[Y_{l_x}(\hat{x}) \otimes Y_{l_y}(\hat{y}) \right]_{l' m_l'} = \delta_{l_x l_x'} \delta_{l_y l_y'} \delta_{l l'} \delta_{m_l m_l'} \quad (33)$$

Los armónicos hiperesféricos, como se indica en la ecuación (18), almacenan la dependencia angular al completo. En la representación de posiciones son:

$$\Upsilon_{K l m_l}^{l_x l_y}(\Omega) = \langle \alpha | K l_x l_y \rangle \langle \hat{x}, \hat{y} | l_x l_y; l m_l \rangle = \langle \Omega | K l_x l_y; l m_l \rangle, \quad (34)$$

donde $|\Omega\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\hat{x}, \hat{y}\rangle$ y $\langle \alpha | Kl_x l_y \rangle = \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)$. Los armónicos hiperesféricos son autovectores comunes del CCOC $\{\hat{K}^2, \hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}_z^2\}$, y constituyen una base del espacio de coordenadas angulares $\{\Omega\}$, y cumplen las siguientes propiedades:

$$\hat{K}^2 |Kl_x l_y; l m_l\rangle = K(K+4) |Kl_x l_y; l m_l\rangle, \quad (35a)$$

$$\hat{l}_x^2 |Kl_x l_y; l m_l\rangle = l_x(l_x+1) |Kl_x l_y; l m_l\rangle, \quad (35b)$$

$$\hat{l}_y^2 |Kl_x l_y; l m_l\rangle = l_y(l_y+1) |Kl_x l_y; l m_l\rangle, \quad (35c)$$

$$\hat{l}_z^2 |Kl_x l_y; l m_l\rangle = l(l+1) |Kl_x l_y; l m_l\rangle, \quad (35d)$$

$$l_z |Kl_x l_y; l m_l\rangle = m_l |Kl_x l_y; l m_l\rangle. \quad (35e)$$

Las funciones $\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)$ están relacionadas con el operador hipermomento, cuyo cuadrado se define en la ecuación (11), y tienen la forma:

$$\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) = N_K^{l_x l_y} (\sin \alpha)^{l_x} (\cos \alpha)^{l_y} P_n^{l_x + \frac{1}{2}, l_y + \frac{1}{2}}(\cos 2\alpha), \quad (36)$$

donde $P_n^{a,b}$ es un polinomio de Jacobi de orden n ,

$$P_n^{a,b}(z) = \frac{\Gamma(a+n+1)}{n! \Gamma(a+b+n+1)} \sum_{m=0}^n \binom{n}{m} \frac{\Gamma(a+b+n+m+1)}{\Gamma(a+m+1)} \left(\frac{z-1}{2}\right)^m, \quad (37)$$

y $N_K^{l_x l_y}$ es una constante de normalización:

$$N_K^{l_x l_y} = \left[\frac{2n!(K+2)(n+l_x+l_y+1)!}{\Gamma(n+l_x+3/2)\Gamma(n+l_y+3/2)} \right]^{1/2}. \quad (38)$$

El orden de los polinomios de Jacobi, n , no es arbitrario. Está relacionado con K , y por ello también con el canal, β , a través de

$$K = 2n + l_x + l_y, \quad n \in \mathbb{N}. \quad (39)$$

Se puede deducir que K toma valores desde $l_x + l_y$ hasta infinito aumentando de 2 en 2 unidades. Que el número cuántico K pueda tomar un número infinito de valores implica que el número de canales que contribuyen a la función de onda es infinito. Por obedecer las ecuaciones (35), los armónicos hiperesféricos cumplen la siguiente relación de ortonormalidad:

$$\begin{aligned} \langle Kl_x l_y; l m_l | K' l'_x l'_y; l' m'_l \rangle &= \int (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 d\Omega \left[\Upsilon_{K l m_l}^{l_x l_y}(\Omega) \right]^* \Upsilon_{K' l' m'_l}^{l'_x l'_y}(\Omega) = \\ &= \delta_{KK'} \delta_{l_x l'_x} \delta_{l_y l'_y} \delta_{l l'} \delta_{m_l m'_l}. \end{aligned} \quad (40)$$

Con estas últimas definiciones, toda la parte angular de la función de onda queda descrita, y se puede avanzar hacia los últimos acoplamientos necesarios para obtener la parte angular y de espín al completo.

El número cuántico j_{ab} está asociado a los autovectores del operador \mathbf{j}_{ab} , que es la suma de \mathbf{l} y \mathbf{S}_x :

$$\mathbf{j}_{ab} = \mathbf{l} + \mathbf{S}_x \equiv \mathbf{l} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{S}_x, \quad (41a)$$

$$|\Omega, \sigma_x\rangle = |\Omega\rangle \otimes |\sigma_x\rangle. \quad (41b)$$

El operador \mathbf{j}_{ab} actúa sobre el espacio de coordenadas $\{\Omega, \sigma_x\}$. Para generar este subespacio, se puede usar la base de autovectores comunes del CCOC $\{\hat{K}^2, \hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}_z^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_x^2, \hat{l}_z, \hat{S}_{x_z}\}$:

$$|KlS_x; m_l m_{S_x}\rangle \equiv |K(l_x l_y)l(s_1 s_2)S_x; m_l m_{S_x}\rangle \equiv |Kl_x l_y; l m_l\rangle \otimes |s_1 s_2; S_x m_{S_x}\rangle. \quad (42)$$

Sin embargo, se usará la base acoplada, formada por autovectores comunes del CCOC $\{\hat{K}^2, \hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}_z^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_x^2, \hat{j}_{ab}^2, \hat{j}_{ab_z}\}$, que puede desarrollarse en función de los vectores de la ecuación (42) mediante los coeficientes de Clebsch-Gordan implicados:

$$\begin{aligned} |KlS_x; j_{ab} m_{j_{ab}}\rangle &\equiv |K(l_x l_y)l(s_1 s_2)S_x; j_{ab} m_{j_{ab}}\rangle = \\ &= \sum_{m_l} \sum_{m_{S_x}} \langle KlS_x; m_l m_{S_x} | KlS_x; j_{ab} m_{j_{ab}} \rangle |KlS_x; m_l m_{S_x}\rangle. \end{aligned} \quad (43)$$

El número cuántico j_{ab} y su proyección, $m_{j_{ab}}$, han de cumplir

$$|l - S_x| \leq j_{ab} \leq l + S_x, \quad (44a)$$

$$m_{j_{ab}} = m_l + m_{S_x}. \quad (44b)$$

En la representación de posiciones, se tiene que

$$\left[\Upsilon_{Kl}^{l_x l_y}(\Omega) \otimes \phi_{S_x}(\sigma_x) \right]_{j_{ab} m_{j_{ab}}} = \langle \Omega, \sigma_x | KlS_x; j_{ab} m_{j_{ab}} \rangle \quad (45)$$

El momento angular total del núcleo estudiado viene dado por j , y su proyección, por μ . El número cuántico j está asociado a los autovectores del operador \mathbf{j} , que es la suma de \mathbf{j}_{ab} y \mathbf{S}_3 :

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{ab} + \mathbf{S}_3 \equiv \mathbf{j}_{ab} \otimes \mathbb{I} + \mathbb{I} \otimes \mathbf{S}_3, \quad (46a)$$

$$|\Omega, \sigma\rangle = |\Omega, \sigma_x\rangle \otimes |\sigma_3\rangle. \quad (46b)$$

El operador \mathbf{j} actúa sobre el espacio de coordenadas $\{\Omega, \sigma\}$. Para generar este subespacio, se puede usar la base de autovectores comunes del CCOC $\{\hat{K}^2, \hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_x^2, \hat{j}_{ab}^2, \hat{S}_3^2, \hat{j}_{abz}, \hat{S}_{3z}^2\}$:

$$|Kj_{ab}s_3; m_{j_{ab}} m_{s_3}\rangle \equiv |K(lS_x)j_{ab}s_3; m_{j_{ab}} m_{s_3}\rangle \equiv |KlS_x; j_{ab} m_{j_{ab}}\rangle \otimes |s_3 m_{s_3}\rangle. \quad (47)$$

Sin embargo, se usará la base acoplada, formada por autovectores comunes del CCOC $\{\hat{K}^2, \hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_x^2, \hat{j}_{ab}^2, \hat{S}_3^2, \hat{j}^2, \hat{j}_z^2\}$, que puede desarrollarse en función de los vectores de la ecuación (47) mediante los coeficientes de Clebsch-Gordan implicados:

$$\begin{aligned} |Kj_{ab}s_3; j\mu\rangle &\equiv |K(lS_x)j_{ab}s_3; j\mu\rangle = \\ &= \sum_{m_{j_{ab}}} \sum_{m_{s_3}} \langle Kj_{ab}s_3; m_{j_{ab}} m_{s_3} | Kj_{ab}s_3; j\mu\rangle |Kj_{ab}s_3; m_{j_{ab}} m_{s_3}\rangle. \end{aligned} \quad (48)$$

En las ecuaciones (42) y (47) se han introducido abreviaturas para simplificar la forma de los vectores en notación de Dirac. Conviene deshacer esas abreviaturas momentáneamente para apreciar que todos los números cuánticos que caracterizan los canales, $\beta = \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\}$, están ya incluidos en la base acoplada final. Asimismo, se introduce una nueva notación más intuitiva que tiene esto en cuenta. La base de autovectores comunes del CCOC $\{\hat{K}^2, \hat{l}_x^2, \hat{l}_y^2, \hat{l}^2, \hat{S}_1^2, \hat{S}_2^2, \hat{S}_x^2, \hat{j}_{ab}^2, \hat{S}_3^2, \hat{j}^2, \hat{j}_z^2\}$ se expresa como:

$$|\beta; j\mu\rangle = |Kj_{ab}s_3; j\mu\rangle = |K((l_x l_y)l(s_1 s_2)S_x)j_{ab}s_3; j\mu\rangle \quad (49)$$

Se puede observar que todos los números cuánticos que aparecen en la forma extendida de la base, $|K((l_x l_y)l(s_1 s_2)S_x)j_{ab}s_3; j\mu\rangle$, pertenecen a β , a excepción de s_1 , s_2 y s_3 , que se omiten por ser constantes en los casos abordados en este trabajo.

El número cuántico j y su proyección, μ , han de cumplir

$$|j_{ab} - s_3| \leq j \leq (j_{ab} + s_3), \quad (50a)$$

$$\mu = m_{j_{ab}} + m_{s_3}. \quad (50b)$$

En la representación de posiciones, se puede finalmente expresar la parte angular y de espín de la función de onda al completo como se indicaba inicialmente en la ecuación 17:

$$\mathcal{Y}_\beta^{j\mu}(\Omega, \sigma) = \left\{ \left[\Upsilon_{Kl}^{l_x l_y}(\Omega) \otimes \phi_{S_x}(\sigma_x) \right]_{j_{ab}} \otimes \kappa_{S_3}(\sigma_3) \right\}_{j\mu} = \langle \Omega, \sigma | \beta; j\mu \rangle. \quad (51)$$

Estas funciones, por ser autovectores de los operadores asociados a los números cuánticos de β , cumplen la propiedad de ortonormalidad:

$$\langle \beta; j\mu | \beta'; j\mu \rangle = \delta_{\beta\beta'}. \quad (52)$$

Para los casos estudiados en este trabajo, estados $j^\pi = 0^+$ de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$, se considerará que el espín del *core* (${}^4\text{He}$ y ${}^9\text{Li}$) es $s_3 = 0$. Es conocido que ${}^9\text{Li}$ no puede tener espín nulo, al ser un núcleo con número impar de protones ($Z = 3$) y par de neutrones ($N = 6$). Sin embargo, se hace esta aproximación para simplificar el desarrollo y los cálculos [13]. Al asumir $s_3 = 0$, el acoplamiento dado por la ecuación (46) se reduce a $j = j_{ab}$ y $m_{j_{ab}} = \mu$. Ya que los estados estudiados son 0^+ , se cumplirá $j = j_{ab} = m_{j_{ab}} = 0$. Esto es de esperar porque las dos partículas restantes, dos neutrones, tienden a acoplarse a la configuración de menor energía, es decir, a espín cero y momento angular orbital cero. El acoplamiento con el momento angular de la tercera partícula, nulo, da lugar al momento angular total nulo del núcleo. Podría haber, sin embargo, contribución al estado fundamental por parte de otros estados de acoplamiento.

Los canales compatibles con los sistemas estudiados cumplirán $\beta = \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\} = \{K, l_x, l_y, l, S_x, 0\}$. Dado que $j = j_{ab} = 0$ y que $\mathbf{j}_{ab} = \mathbf{l} + \mathbf{S}_x$, l y S_x tienen que acoplarse a cero. Por otro lado, paridad positiva ($\pi = 1$) implica:

$$(-1)^{l_x+l_y} = 1. \quad (53)$$

A estas condiciones se les debe añadir el principio de Pauli, que impone que la función de onda sea antisimétrica ante el intercambio de neutrones (fermiones) idénticos. Siendo $T_x = 1$ el isospín de la pareja de neutrones, se tiene:

$$(-1)^{l_x+S_x+T_x} = -1 \implies (-1)^{l_x+S_x} = 1. \quad (54)$$

Las condiciones dadas por las expresiones (53) y (54) y la necesidad de acoplar l y S_x a cero limitan los canales compatibles con los estados estudiados. Si se tiene en cuenta que S_x sólo puede ser 0 ó 1 (al provenir del acoplamiento de $s_1 = 1/2$ y $s_2 = 1/2$), se puede separar el problema en dos más sencillos.

El caso $S_x = 0$ implica, teniendo en cuenta $l \in \mathbb{N}_0$, que $l = 0$. Además, la ecuación (54), con $S_x = 0$, da lugar a que l_x sea par. Acoplar l_x y l_y a $l = 0$ sólo es posible con $l_x = l_y$. Por último, aplicar $\pi = 1$ (ecuación (53)) permite deducir que l_y ha de ser par, al igual que l_x .

El caso $S_x = 1$ implica $l = 1$. La ecuación (54) sólo deja disponibles los valores impares de l_x . Acoplar l_x y l_y a $l = 1$ conlleva $|l_x - l_y| \leq 1$, y la ecuación (53) obliga a l_y a ser

impar (por ser l_x impar). Como consecuencia, $|l_x - l_y| \neq 1$, luego de nuevo $|l_x - l_y| = 0$.

Este conjunto de condiciones, tanto para $S_x = 0$ como para $S_x = 1$, dan lugar a un número infinito de canales compatibles con el problema estudiado, debido a que $K = 2n + l_x + l_y$, con $n \in \mathbb{N}_0$. En la tabla 1, a modo de ejemplo, se muestran todos los canales compatibles con los estados 0^+ de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$ para un valor máximo de K dado por $K_{max} = 10$.

K	l_x	l_y	l	S_x	j_{ab}
0, 2, ..., 10	0	0	0	0	0
4, 6, 8, 10	2	2	0	0	0
8, 10	4	4	0	0	0
2, 4, ..., 10	1	1	1	1	0
6, 8, 10	3	3	1	1	0
10	5	5	1	1	0

Tabla 1: Canales (β) compatibles con los estados 0^+ de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$ con $K_{max} = 10$.

2.3.2. Parte hiperradial

La parte hiperradial de función de onda no tiene una expresión analítica, a diferencia de la parte angular. Sin embargo, existen métodos para estimar estas funciones.

Uno de ellos consiste en resolver un sistema de ecuaciones acopladas que se puede obtener a partir de la ecuación de Schrödinger,

$$\hat{H}(\rho, \Omega)\psi^{\nu j \mu}(\rho, \Omega, \sigma) = \varepsilon_{\nu j}\psi^{\nu j \mu}(\rho, \Omega, \sigma). \quad (55)$$

Separando las partes de energía cinética y potencial del hamiltoniano y utilizando la función de onda de la forma que indica la ecuación (15), se obtiene:

$$\begin{aligned} \hat{T}(\rho, \Omega)\rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)\mathcal{Y}_{\beta'}^{j \mu}(\Omega, \sigma) + \hat{V}(\rho, \Omega)\rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)\mathcal{Y}_{\beta'}^{j \mu}(\Omega, \sigma) = \\ = \varepsilon_{\nu j} \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)\mathcal{Y}_{\beta'}^{j \mu}(\Omega, \sigma). \end{aligned} \quad (56)$$

La forma explícita del operador energía cinética, que se muestra en la ecuación (12), y la relación $\hat{K}^2(\Omega)\mathcal{Y}_{\beta'}^{j \mu}(\Omega, \sigma) = K(K + 4)\mathcal{Y}_{\beta'}^{j \mu}(\Omega, \sigma)$ permiten reorganizar el término cinético

de la ecuación de Schrödinger:

$$\hat{T}(\rho, \Omega) \left[\rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) \mathcal{Y}_{\beta'}^{j\mu}(\Omega, \sigma) \right] = \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \hat{T}_U(\rho) \left[\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) \right] \mathcal{Y}_{\beta'}^{j\mu}(\Omega, \sigma), \quad (57)$$

con

$$\hat{T}_U(\rho) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15/4 + K(K+4)}{\rho^2} \right]. \quad (58)$$

Se puede continuar el desarrollo aplicando la ecuación (57) en la expresión (56), y operando sobre el resultado con el *bra* asociado a la parte angular, $\langle \beta; j\mu |$, por la izquierda. La parte angular de las funciones mostradas en la ecuación (56), por tanto, también tendrá que escribirse en notación de Dirac:

$$\begin{aligned} & \langle \beta; j\mu | \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \hat{T}_U(\rho) \left[\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) \right] | \beta'; j\mu \rangle + \langle \beta; j\mu | \hat{V}(\rho, \Omega) \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) | \beta'; j\mu \rangle = \\ & = \langle \beta; j\mu | \varepsilon_{\nu j} \rho^{-5/2} \sum_{\beta} \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) | \beta; j\mu \rangle. \end{aligned} \quad (59)$$

Esta ecuación es una suma de tres elementos de matriz, que constituyen tres integrales sobre todo el subespacio angular, $\{\Omega\}$. Por tanto, las funciones y operadores que dependen exclusivamente del hiperradio, ρ , se comportan como constantes:

$$\begin{aligned} & \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \hat{T}_U(\rho) \left[\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) \right] \langle \beta; j\mu | \beta'; j\mu \rangle + \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) \langle \beta; j\mu | \hat{V}(\rho, \Omega) | \beta'; j\mu \rangle = \\ & = \varepsilon_{\nu j} \rho^{-5/2} \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) \langle \beta; j\mu | \beta; j\mu \rangle. \end{aligned} \quad (60)$$

Aplicando las relaciones de ortonormalidad indicadas en la ecuación (52), reorganizando los términos, y expresando $\hat{T}_U(\rho)$ según (58), se llega a la expresión

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15/4 + K(K+4)}{\rho^2} \right) - \varepsilon_{\nu j} \right] \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) + \sum_{\beta'} \chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho) V_{\beta\beta'}^{j\mu}(\rho) = 0, \quad (61)$$

que describe un sistema de tantas ecuaciones acopladas como canales compatibles con $j\mu$ tenga el estado estudiado. El hipermomento, K , define una barrera centrífuga en tres cuerpos, análoga a la que define el momento angular orbital en problemas de dos cuerpos. Se ha introducido la abreviatura

$$V_{\beta\beta'}^{j\mu}(\rho) = \langle \beta; j\mu | \hat{V}(\rho, \Omega) | \beta'; j\mu \rangle. \quad (62)$$

Resolver el sistema de ecuaciones acopladas (61) numéricamente permite calcular las funciones hiperradiales, pero resulta más sencillo aplicar el conocido como método de los pseudoestados.

En general, el método de los pseudoestados (PS) consiste en expresar los autovectores $\{|e_k\rangle\}$ del hamiltoniano de un sistema como un desarrollo en serie de vectores de una base ortonormal conocida, $\{|u_n\rangle\}$, cuyas funciones sean de cuadrado integrable:

$$|e_k\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} |u_n\rangle. \quad (63)$$

Si se substituye esto en la ecuación de Schrödinger, se obtiene:

$$\hat{H} \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} |u_n\rangle = E_k \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} |u_n\rangle. \quad (64)$$

Por último, si se aplica el *bra* $\langle u_m|$ por la izquierda, queda:

$$\sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \langle u_m | \hat{H} |u_n\rangle = E_k \sum_{n=1}^{\infty} c_n^{(k)} \langle u_m |u_n\rangle = E_k c_m^{(k)}. \quad (65)$$

Se puede expresar esta última ecuación en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} H_{1,1} & H_{1,2} & \dots \\ H_{2,1} & H_{2,2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1^{(k)} \\ c_2^{(k)} \\ \vdots \end{pmatrix} = E_k \begin{pmatrix} c_1^{(k)} \\ c_2^{(k)} \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad (66)$$

donde $H_{m,n} = \langle u_m | \hat{H} |u_n\rangle$. Conocer los coeficientes $\{c_n^{(k)}\}$ y los vectores de la base $\{|u_n\rangle\}$, permite conocer los vectores de la base $\{|e_k\rangle\}$. Resolver este problema es equivalente a diagonalizar la matriz del hamiltoniano.

Se puede hacer un desarrollo análogo al seguido en las ecuaciones (63)-(66) para calcular las funciones hiperradiales del problema de tres cuerpos. Cada una de ellas puede expresarse como un desarrollo en serie de funciones de la base de oscilador armónico transformado (THO). Las funciones de esta base, $U_{i\beta}^{THO}(\rho)$, son funciones de cuadrado sumable que surgen de la transformación de las funciones del oscilador armónico (HO). Una de las consecuencias de esta transformación es un cambio en el comportamiento asintótico. Las funciones HO tienen un comportamiento asintótico gaussiano, mientras que las THO tienen un decaimiento exponencial, que es el comportamiento conocido de los sistemas físicos ligados [1, 14].

Para que los desarrollos se correspondan exactamente con las funciones hiperradiales, cada canal necesitaría un número infinito de funciones $U_{i\beta}^{THO}(\rho)$ de la base THO. Sin embargo, se hace una aproximación truncando el número de sumandos en i_{max} , donde i se denomina

excitación hiperradial [1]. Las funciones hiperradiales, por tanto, se pueden expresar de la siguiente forma:

$$\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) = \sum_{i=0}^{i_{max}} C_{i\beta}^{\nu j} U_{i\beta}^{THO}(\rho). \quad (67)$$

Conociendo la base de funciones de cuadrado integrable, $\{U_{i\beta}^{THO}(\rho)\}$, y los coeficientes del desarrollo, $\{C_{i\beta}^{\nu j}\}$, también se conocería el conjunto de funciones hiperradiales, $\{\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho)\}$. Sin embargo, el número de canales que contribuyen a la función de onda del sistema es infinito, como se ve en la ecuación (39), y es necesario, en la práctica, limitar el cálculo. Se establece un valor máximo de K , K_{max} , que limita el número de canales que describen el sistema. Previamente se ha indicado que el número de excitaciones hiperradiales, $(i_{max}+1)$, también es finito. Bajo estas aproximaciones, el número de coeficientes, $C_{i\beta}^{\nu j}$, necesarios para determinar todas las funciones hiperradiales del sistema es finito.

Las funciones de la base de oscilador armónico transformado son reales y cumplen la siguiente relación [1]:

$$\int d\rho U_{i'\beta}^{THO}(\rho) U_{i\beta}^{THO}(\rho) = \delta_{i'i}. \quad (68)$$

La ecuación (67) puede trasladarse a la expresión de la función de onda (15):

$$\psi^{\nu j\mu}(\rho, \Omega, \sigma) = \rho^{-5/2} \sum_{\beta}^{\beta_{max}} \sum_{i=0}^{i_{max}} C_{i\beta}^{\nu j} U_{i\beta}^{THO}(\rho) \mathcal{Y}_{\beta}^{j\mu}(\Omega, \sigma), \quad (69)$$

donde se puede ver que el sumatorio asociado a los canales se ve limitado por β_{max} . No se ha establecido un criterio para ordenar los canales; se intenta expresar que el número de canales está limitado por K_{max} . Escribiendo (69) en notación de Dirac, obtenemos una ecuación análoga a (63):

$$|\nu; j\mu\rangle = \sum_{\beta}^{\beta_{max}} \sum_{i=0}^{i_{max}} C_{i\beta}^{\nu j} |i\beta; j\mu\rangle, \quad (70)$$

Donde se ha aplicado (16) y $|i\beta; j\mu\rangle \rightarrow \left[\rho^{-5/2} U_{i\beta}^{THO}(\rho) \mathcal{Y}_{\beta}^{j\mu}(\Omega, \sigma) \right]$. Se puede aplicar el operador hamiltoniano para obtener una ecuación similar a (64),

$$\hat{H}(\rho, \Omega) \sum_{\beta'}^{\beta'_{max}} \sum_{i'=0}^{i'_{max}} C_{i'\beta'}^{\nu j} |i'\beta'; j\mu\rangle = \varepsilon_{\nu j} \sum_{\beta'}^{\beta'_{max}} \sum_{i'=0}^{i'_{max}} C_{i'\beta'}^{\nu j} |i'\beta'; j\mu\rangle, \quad (71)$$

en la que se utilizan β' e i' arbitrariamente en lugar de β e i para simplificar el siguiente

paso, que consiste en operar con el *bra* $\langle i\beta; j\mu |$ por la izquierda:

$$\sum_{\beta'} \sum_{i'=0}^{i'_{max}} \langle i\beta; j\mu | \hat{H}(\rho, \Omega) | i'\beta'; j\mu \rangle C_{i'\beta'}^{\nu j} = \varepsilon_{\nu j} \sum_{\beta'} \sum_{i'=0}^{i'_{max}} \langle i\beta; j\mu | i'\beta'; j\mu \rangle C_{i'\beta'}^{\nu j}. \quad (72)$$

Las relaciones de ortogonalidad de $|i\beta; j\mu\rangle$ son necesarias para continuar con el desarrollo. Pasando a la representación de posiciones, aplicando las relaciones (52) y (68), se tiene:

$$\begin{aligned} \langle i\beta; j\mu | i'\beta'; j\mu \rangle &= \langle \beta; j\mu | \beta'; j\mu \rangle \int \rho^5 \left[\rho^{-5/2} U_{i\beta}^{THO}(\rho) \right]^* \left[\rho^{-5/2} U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \right] = \\ &= \langle \beta; j\mu | \beta'; j\mu \rangle \int d\rho \left[U_{i\beta}^{THO}(\rho) \right]^* U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) = \delta_{ii'} \delta_{\beta\beta'}. \end{aligned} \quad (73)$$

La ecuación (72), por tanto, puede simplificarse:

$$\sum_{\beta'} \sum_{i'=0}^{i'_{max}} H_{\beta\beta'}^{ii'} C_{i'\beta'}^{\nu j} = \varepsilon_{\nu j} C_{i\beta}^{\nu j}, \quad (74)$$

donde $H_{\beta\beta'}^{ii'}$ son los elementos de matriz del hamiltoniano en la base de vectores $\{|i\beta; j\mu\rangle\}$:

$$H_{\beta\beta'}^{ii'} = \langle i\beta; j\mu | \hat{H}(\rho, \Omega) | i'\beta'; j\mu \rangle. \quad (75)$$

Conocer estos elementos de matriz, que pueden calcularse integrando numéricamente (pues la base $\{|i\beta; j\mu\rangle\}$ es conocida) da acceso a los coeficientes $C_{i\beta}^{\nu j}$ resolviendo el problema de autovalores que esboza la ecuación (74) y que se detallará a continuación.

Se definen las matrices $H_{\beta\beta'}$ y $C_{\beta}^{\nu j}$:

$$H_{\beta\beta'} = \begin{pmatrix} H_{\beta\beta'}^{1,1} & \dots & H_{\beta\beta'}^{i,i} & \dots & H_{\beta\beta'}^{1,i_{max}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{\beta\beta'}^{i,1} & \dots & H_{\beta\beta'}^{i,i} & \dots & H_{\beta\beta'}^{i,i_{max}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{\beta\beta'}^{i_{max},1} & \dots & H_{\beta\beta'}^{i_{max},i} & \dots & H_{\beta\beta'}^{i_{max},i_{max}} \end{pmatrix}, \quad (76a)$$

$$C_{\beta}^{\nu j} = \begin{pmatrix} C_{1\beta}^{\nu j} \\ \vdots \\ C_{i\beta}^{\nu j} \\ \vdots \\ C_{i_{max}\beta}^{\nu j} \end{pmatrix}. \quad (76b)$$

El problema de autovalores de la ecuación (74) puede expresarse en forma matricial:

$$\begin{pmatrix} H_{\beta_1\beta_1} & H_{\beta_1\beta_2} & \cdots & H_{\beta_1\beta_{max}} \\ H_{\beta_2\beta_1} & H_{\beta_2\beta_2} & \cdots & H_{\beta_2\beta_{max}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{\beta_{max}\beta_1} & H_{\beta_{max}\beta_2} & \cdots & H_{\beta_{max}\beta_{max}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{\beta_1}^{\nu j} \\ C_{\beta_2}^{\nu j} \\ \vdots \\ C_{\beta_{max}}^{\nu j} \end{pmatrix} = \varepsilon_{\nu j} \begin{pmatrix} C_{\beta_1}^{\nu j} \\ C_{\beta_2}^{\nu j} \\ \vdots \\ C_{\beta_{max}}^{\nu j} \end{pmatrix}, \quad (77)$$

donde las matrices que representan al hamiltoniano y al vector de coeficientes se han estructurado en bloques dados por las expresiones (76).

2.4. Densidades de probabilidad

Las densidad de probabilidad asociada a la función de onda total del estado del sistema permite conocer la configuración espacial de los tres cuerpos del núcleo, es decir, da información sobre sus posiciones relativas. A su vez, permite calcular, integrando sobre los subespacios adecuados, las densidades de probabilidad relacionadas con magnitudes y probabilidades de interés.

En este apartado, por simplicidad, se eliminará la parte de espín de la función de onda del estado del sistema, luego la ecuación (15) es adaptada sustituyendo las funciones $\mathcal{Y}_{\beta}^{j\mu}(\Omega, \sigma)$ por los armónicos hipersféricos, que almacenan toda la dependencia angular. La función de onda total se expresaría de la siguiente forma:

$$\psi^{\nu j\mu}(\rho, \Omega) = \rho^{-5/2} \sum_{\beta} \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) \Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega). \quad (78)$$

Conviene, para hacer más sencilla la notación en los siguientes desarrollos, redefinir el conjunto de números cuánticos que constituyen el canal. En este apartado, el canal vendrá dado por $\beta = \{K, l_x, l_y, l, m_l\}$. De esta forma, la ecuación (40) puede reescribirse como

$$\int d\Omega (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 \left[\Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega) \right]^* \Upsilon_{K'l'm'_l}^{l'_x l'_y}(\Omega) = \delta_{\beta\beta'}. \quad (79)$$

2.4.1. Densidades de probabilidad en coordenadas hipersféricas

Para calcular la densidad de probabilidad total, es útil partir de la probabilidad asociada al elemento de volumen. Se ha de tener en cuenta que cada sistema de coordenadas

lleva asociado su propio elemento de volumen, afectando a la expresión de la densidad de probabilidad total. La densidad de probabilidad total en coordenadas hipersféricas, $D_{\rho,\Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega)$, cumple:

$$D_{\rho,\Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) d\rho d\Omega = |\psi^{\nu j\mu}(\rho, \Omega)|^2 \rho^5 (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 d\rho d\Omega. \quad (80)$$

Utilizando la ecuación (15), se puede expresar la densidad de probabilidad total en función de las partes hiperradial y angular de la función de onda:

$$\begin{aligned} D_{\rho,\Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) &= |\psi^{\nu j\mu}(\rho, \Omega)|^2 \rho^5 (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 = \\ &= (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 \sum_{\beta'} \sum_{\beta} [\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)]^* \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) [\Upsilon_{K'l'm_l}^{\nu j}(\Omega)]^* \Upsilon_{Klm_l}^{\nu j}(\Omega). \end{aligned} \quad (81)$$

Conviene estudiar la norma de la función de onda total. Esto puede hacerse integrando directamente sobre todo el espacio, pero es más interesante integrar primero sobre subespacios, para obtener densidades de probabilidad asociadas a los subespacios complementarios.

Integrar sobre el subespacio de coordenadas angulares excluyendo la coordenada hiperangular, $\{\theta_x, \phi_x, \theta_y, \phi_y\} \equiv \{\hat{x}, \hat{y}\}$, permite obtener la densidad de probabilidad en el plano dado por las coordenadas $\{\rho, \alpha\}$, $D_{\rho,\alpha}^{\nu j}(\rho, \alpha)$:

$$\begin{aligned} D_{\rho,\alpha}^{\nu j}(\rho, \alpha) &= \int d\hat{x} \int d\hat{y} D_{\rho,\Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) = \\ &= (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 \sum_{\beta'} \sum_{\beta} [\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)]^* \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) \int d\hat{x} \int d\hat{y} [\Upsilon_{K'l'm_l}^{\nu j}(\Omega)]^* \Upsilon_{Klm_l}^{\nu j}(\Omega). \end{aligned} \quad (82)$$

Para obtener una expresión explícita de $D_{\rho,\alpha}^{\nu j}(\rho, \alpha)$, ayuda estructurar los canales de una forma distinta: $\beta = \{K, l_x, l_y, l, m_l\} = \{K, \gamma\}$, con $\gamma = \{l_x, l_y, l, m_l\}$. Reorganizar los sumatorios e índices de acuerdo con este cambio y utilizar la forma extensa de los armónicos hipersféricos (ecuación (18)), permite escribir la ecuación (82) de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} D_{\rho,\alpha}^{\nu j}(\rho, \alpha) &= \int d\hat{x} \int d\hat{y} D_{\rho,\Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) = (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 \sum_{K', \gamma'} \sum_{K, \gamma} [\chi_{K', \gamma'}^{\nu j}(\rho)]^* \chi_{K, \gamma}^{\nu j}(\rho) \\ &\times \int d\hat{x} \int d\hat{y} \left[\varphi_{K'}^{\nu j}(\alpha) \left[Y_{l_x}^{m_x}(\hat{x}) \otimes Y_{l_y}^{m_y}(\hat{y}) \right]_{l'm_l'} \right]^* \varphi_K^{\nu j}(\alpha) \left[Y_{l_x}(\hat{x}) \otimes Y_{l_y}(\hat{y}) \right]_{lm_l}. \end{aligned} \quad (83)$$

Aplicando las relaciones de ortonormalidad de la ecuación (33), se eliminan los términos del sumatorio que no coinciden en γ , y se llega a una expresión compacta para la densidad

de probabilidad en el plano (ρ, α) :

$$\begin{aligned}
D_{\rho, \alpha}^{\nu j}(\rho, \alpha) &= \int d\hat{x} \int d\hat{y} D_{\rho, \Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) = \\
&= (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 \sum_{K, K'} \sum_{\gamma} [\chi_{K', \gamma'}^{\nu j}(\rho)]^* \chi_{K, \gamma}^{\nu j}(\rho) [\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)]^* \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha).
\end{aligned} \tag{84}$$

Cabe mencionar que en esta expresión se podrían omitir las operaciones de conjugación compleja para las funciones hiperangulares, que son reales siempre atendiendo a su definición (36), y para las funciones hiperradiales, que son reales en los casos tratados en este trabajo.

Si se integra la densidad de probabilidad total, $D_{\rho, \Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega)$, sobre todo el subespacio de coordenadas angulares, $\{\Omega\} = \{\theta_x, \phi_x, \theta_y, \phi_y, \alpha\}$, y se aplican las relaciones de ortonormalidad indicadas en la ecuación (40), se obtiene la densidad de probabilidad hiperradial, $D_{\rho}^{\nu j}(\rho)$:

$$\begin{aligned}
D_{\rho}^{\nu j}(\rho) &= \int d\Omega D_{\rho, \Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) = \\
&= \sum_{\beta'} \sum_{\beta} [\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)]^* \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) \int (\sin \alpha)^2 (\cos \alpha)^2 d\Omega \left[\Upsilon_{K l m_l}^{l_x l_y}(\Omega) \right]^* \Upsilon_{K' l' m_{l'}}^{l_x l_y}(\Omega) = \\
&= \sum_{\beta'} \sum_{\beta} [\chi_{\beta'}^{\nu j}(\rho)]^* \chi_{\beta}^{\nu j}(\rho) \delta_{\beta' \beta} = \sum_{\beta} |\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho)|^2.
\end{aligned} \tag{85}$$

Para integrar la densidad de probabilidad hiperradial sobre el subespacio angular, se desarrollan las funciones hiperradiales en función de la base THO (ecuación (67)) y se aplica la ecuación (68). El resultado de estas operaciones es la norma de la función de onda total, que está normalizada:

$$\begin{aligned}
\int \int d\rho d\Omega D_{\rho, \Omega}^{\nu j}(\rho, \Omega) &= \int d\rho D_{\rho}^{\nu j}(\rho) = \sum_{\beta} \int d\rho |\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho)|^2 = \\
&= \sum_{\beta} \sum_{i, i'} (C_{\beta}^{i j})^* C_{\beta}^{i' j} \int d\rho [U_{\beta}^{i THO}(\rho)]^* U_{\beta}^{i' THO}(\rho) = \sum_{\beta} \sum_i |C_{\beta}^{i j}|^2 = 1
\end{aligned} \tag{86}$$

Nótese que la norma de la función de onda puede obtenerse como una suma de las integrales de cada función $|\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho)|^2$ por separado, lo que permite asociar una contribución a cada canal (β) . Se puede entender que la densidad hiperradial total es una suma de densidades hiperradiales asociadas a cada canal:

$$D_{\rho, \Omega}^{\nu j}(\rho) = \sum_{\beta} D_{\rho, \Omega}^{\beta \nu j}(\rho) = \sum_{\beta} |\chi_{\beta}^{\nu j}(\rho)|^2. \tag{87}$$

2.4.2. Densidades de probabilidad en coordenadas de Jacobi

En este apartado se obtienen expresiones para las densidades de probabilidad en el plano (x, y) , $D_{x,y}^{\nu j}(x, y)$, en el plano (r_x, r_y) , $D_{r_x, r_y}^{\nu j}(r_x, r_y)$, en el subespacio correspondiente a r_x , $D_{r_x}^{\nu j}(r_x)$, y en el subespacio correspondiente a r_y , $D_{r_y}^{\nu j}(r_y)$.

Para obtener la densidad de probabilidad en el plano (x, y) , aplicaremos la conservación de la probabilidad para un elemento de volumen dado, y tendremos en cuenta la expresión (5), que relaciona $dxdy$ con $d\rho d\Omega$:

$$D_{x,y}^{\nu j}(x, y)dxdy = D_{\rho, \alpha}^{\nu j}(\rho, \alpha)d\rho d\alpha = D_{\rho, \alpha}^{\nu j}(\rho(x, y), \alpha(x, y))\frac{1}{\rho(x, y)}dxdy. \quad (88)$$

La densidad de probabilidad en el plano (x, y) puede derivarse de (84) aplicando

$$D_{x,y}^{\nu j}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} D_{\rho, \alpha}^{\nu j}(\sqrt{x^2 + y^2}, \arctan \frac{x}{y}). \quad (89)$$

Una expresión algo más explícita sería

$$D_{x,y}^{\nu j}(x, y) = \sum_{\gamma} \frac{x^{2(l_x+1)} y^{2(l_y+1)}}{(x^2 + y^2)^{l_x+l_y+5/2}} \sum_K \sum_{K'} [N_{K'}^{l_x l_y}]^* N_K^{l_x l_y} \times [\chi_{K', \gamma}^{\nu j}(\sqrt{x^2 + y^2})]^* \chi_{K, \gamma}^{\nu j}(\sqrt{x^2 + y^2}) [P_n^{l_x+\frac{1}{2}, l_y+\frac{1}{2}}(\frac{y^2 - x^2}{y^2 + x^2})]^* P_n^{l_x+\frac{1}{2}, l_y+\frac{1}{2}}(\frac{y^2 - x^2}{y^2 + x^2}), \quad (90)$$

donde se indica $[N_{K'}^{l_x l_y}]^*$ a pesar de que las constantes de normalización $N_K^{l_x l_y}$ son reales. Esta ecuación permite observar que la densidad de probabilidad en el plano (x, y) puede expresarse como una suma de densidades de probabilidad asociadas a los conjuntos de números cuánticos γ :

$$D_{x,y}^{\nu j}(x, y) = \sum_{\gamma} D_{x,y}^{\gamma \nu j}(x, y), \quad (91)$$

con

$$D_{x,y}^{\gamma \nu j}(x, y) = \left| \frac{x^{(l_x+1)} y^{(l_y+1)}}{(x^2 + y^2)^{l_x/2+l_y/2+5/4}} \sum_K N_K^{l_x l_y} \chi_{K, \gamma}^{\nu j}(\sqrt{x^2 + y^2}) P_n^{l_x+\frac{1}{2}, l_y+\frac{1}{2}}(\frac{y^2 - x^2}{y^2 + x^2}) \right|^2. \quad (92)$$

Esto permite calcular la norma como la suma de las integrales de las densidades de probabilidad de cada conjunto γ y, por tanto, registrar la contribución de cada una de ellos.

Cabe recordar que r_x es la distancia neutrón-neutrón, y r_y es la distancia *core*-dineutrón. Para trabajar con estas distancias físicas, se calcula la densidad de probabilidad en el

plano (r_x, r_y) utilizando la expresión (7):

$$D_{r_x, r_y}^{\nu j}(r_x, r_y) dr_x dr_y = D_{x, y}^{\nu j}(x, y) dx dy = D_{x, y}^{\nu j}(x(r_x), r_y(y)) \frac{m}{\sqrt{a_x a_y}} dx dy. \quad (93)$$

La densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y) queda, por tanto:

$$D_{r_x, r_y}^{\nu j}(r_x, r_y) = \frac{m}{\sqrt{a_x a_y}} D_{x, y}^{\nu j} \left(r_x \sqrt{\frac{a_x}{m}}, r_y \sqrt{\frac{a_y}{m}} \right). \quad (94)$$

Las densidades de probabilidad asociadas a r_x y r_y puede obtenerse integrando la densidad asociada al plano de la siguiente forma:

$$D_{r_x}^{\nu j}(r_x) = \int_0^\infty dr_y D_{r_x, r_y}^{\nu j}(r_x, r_y), \quad (95a)$$

$$D_{r_y}^{\nu j}(r_y) = \int_0^\infty dr_x D_{r_x, r_y}^{\nu j}(r_x, r_y). \quad (95b)$$

2.5. Observables

A partir de las densidades de probabilidad definidas en el apartado anterior, es posible estudiar propiedades del sistema a través del valor medio de magnitudes de interés o de probabilidades asociadas a configuraciones específicas.

2.5.1. Contenido de dineutrón y *cigar-like*

Se puede estudiar un núcleo de tres cuerpos del tipo *core + n + n* como sistema global, evaluando al mismo tiempo características asociadas a r_x y r_y , a través de las conocidas en la literatura como configuraciones dineutrón y *cigar-like* [4]. Un núcleo estaría en configuración dineutrón si la distancia neutrón-neutrón es considerablemente menor que la distancia *core*-dineutrón. La configuración *cigar-like*, por su parte, se caracteriza por presentar r_x considerablemente mayor que r_y .

Al estado de un sistema de tres cuerpos se le puede asignar una probabilidad de dineutrón P_d y de *cigar-like*, P_c . Con la intención de poder comparar núcleos del tipo *core + n + n* independientemente de la definición de P_d y P_c , se define el parámetro

$$\eta = \frac{P_d - P_c}{P_d + P_c}. \quad (96)$$

Se puede observar que, sin importar los valores máximos que puedan tomar las probabilidades, $\eta = 1$ en el caso $P_c = 0$ (puro dineutrón), y $\eta = -1$ en el caso $P_d = 0$ (puro *cigar-like*). Nótese también que $\eta > 0$ implica $P_d > P_c$, y $\eta < 0$, $P_d < P_c$.

Salvo los casos límite, no es trivial definir una separación clara entre una configuración y otra. No existe una única forma de hacerlo. En este trabajo se propone dividir el plano (r_x, r_y) en una zona dineutrón, $r_x \leq \sqrt{\frac{a_y}{a_x}} r_y$ y otra *cigar-like*, $r_x > \sqrt{\frac{a_y}{a_x}} r_y$. Una forma compacta de entender esta división pasa por asociar a la configuración dineutrón la zona $x \leq y$ del plano (x, y) . En el plano (ρ, α) se le asocia, por tanto, la zona $\alpha \leq \pi/4$. Las regiones complementarias se identifican con la configuración *cigar-like*.

De acuerdo con las regiones descritas, en este trabajo se utilizan estas definiciones para las probabilidades de dineutrón y *cigar-like*:

$$P_d^{\nu j} = \iint_{x < y} dx dy D_{x,y}^{\nu j}(x, y), \quad (97a)$$

$$P_c^{\nu j} = \iint_{x > y} dx dy D_{x,y}^{\nu j}(x, y). \quad (97b)$$

Para una función de onda normalizada, si se obedece este esquema de integración, $P_d + P_c = 1$. Si se definen las regiones de dineutrón y *cigar-like* como regiones no complementarias, la suma de las probabilidades no sería uno.

2.5.2. Radios cuadráticos medios

Las densidades de probabilidad asociadas a subespacios de una sola dimensión también son útiles para estudiar núcleos de tres cuerpos. Las siguientes ecuaciones permiten obtener valores íntimamente relacionados con el radio de materia del núcleo [1]:

$$\langle \rho \rangle = \int_0^\infty d\rho \rho D_\rho^{\nu j}(\rho), \quad (98a)$$

$$\langle \rho^2 \rangle = \int_0^\infty d\rho \rho^2 D_\rho^{\nu j}(\rho), \quad (98b)$$

$$\Delta \rho = \sqrt{\langle \rho^2 \rangle - \langle \rho \rangle^2}. \quad (98c)$$

Expresiones completamente análogas (utilizando las densidades de probabilidad apropiadas) dan lugar a $\langle r_x \rangle$, $\langle r_x^2 \rangle$, Δr_x , $\langle r_y \rangle$, $\langle r_y^2 \rangle$ y Δr_y . Los valores asociados a la coordenada

r_x dan información acerca de la distancia neutrón-neutrón, y los asociados a r_y , acerca de la distancia *core*-dineutrón. Adicionalmente, a estos subsistemas se les puede asignar una energía de ligadura efectiva a partir del comportamiento asintótico de la densidad de probabilidad correspondiente.

2.5.3. Comparación con el deuterón (${}^2\text{H}$)

A partir de las densidades de probabilidad asociadas a r_x , en este trabajo se estudian distribuciones neutrón-neutrón para ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$. Para tener un punto de referencia se puede hacer una comparación con la función de onda del deuterón (${}^2\text{H}$). Se puede reproducir esta función de onda mediante la forma analítica de Hulthén [15][16], que es una función radial asociada a la distancia protón-neutrón.

El tratamieto que se hará en este apartado para la densidad de probabilidad de Hulthén es completamente aplicable a los subsistemas neutrón-neutrón que se trabajarán posteriormente. Para hacer explícito el paralelismo, la función de onda del deuterón se expresará en términos de r_x en lugar de r . Siendo $w(r_x)$ la función de onda del sistema neutrón-protón, la función $u(r_x)$ viene dada por [15][16]:

$$u(r_x) = w(r_x)/r_x = N(e^{-ar_x} + e^{-br_x}). \quad (99)$$

El parámetro a puede calcularse a partir de la masa de un nucleón (m) y la energía del deuterón (ε_x)[15]:

$$a = \sqrt{m\varepsilon_x} = 0,2316 \text{ fm}^{-1}. \quad (100)$$

El parámetro b puede derivarse de a a través de $b = 5,98a$, y N es una constante de normalización que resulta $N^2 = 0,783$. Se muestra la función $u(r_x)$ en la figura 3. La densidad de probabilidad asociada a r_x para el deuterón puede obtenerse a través de

$$D_{r_x}(r_x) = \int r_x^2 dr_x |w(r_x)|^2 = \int dr_x |u(r_x)|^2, \quad (101)$$

y se representa en la figura 4. En esa figura se puede observar que se ha ajustado la parte asintótica de la densidad de probabilidad mediante una función de la forma $Ce^{-2k_x r_x}$. Esta es la forma asintótica que se espera para todo potencial de corto alcance. Es útil tener en cuenta el logaritmo en base e de la densidad de probabilidad,

$$\log(D_{r_x}(r_x)) = \log(C) - 2k_x r_x, \quad (102)$$

que facilita una expresión para llevar a cabo un ajuste lineal. A partir de la pendiente ($-2k_x$), se puede obtener la energía de ligadura del deuterón mediante la expresión

$$k_x = \frac{\sqrt{2\mu_x \varepsilon_x}}{\hbar}, \quad (103)$$

donde μ_x es la masa reducida del sistema protón-neutrón. Esta ecuación, que se podrá utilizar junto a la ecuación (102) en los sistemas neutrón-neutrón de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$, arroja un valor $\varepsilon_x = 2,2416$ MeV para la energía de ligadura, coincidente con el que se obtiene a partir de la expresión (100).

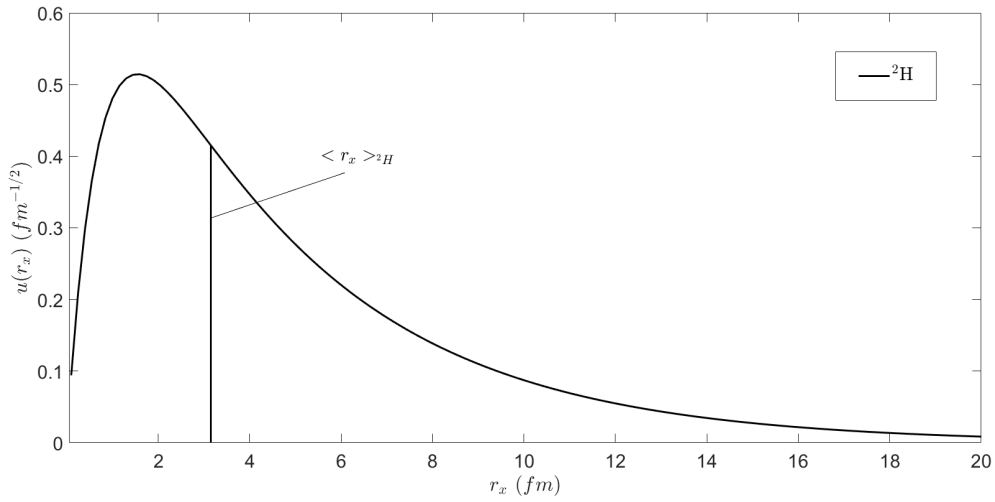


Figura 3: Función $u(r_x)$ de Hulthén para el deuterón (${}^2\text{H}$) (línea negra continua).

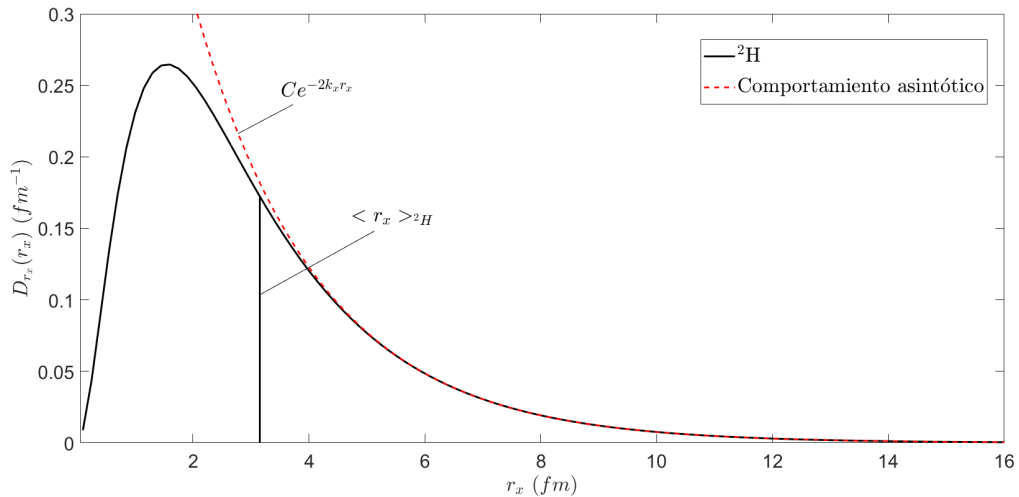


Figura 4: Densidad de probabilidad radial (r_x) del deuterón (${}^2\text{H}$) a partir de la función de Hulthén (línea negra continua). Ajuste exponencial para el comportamiento asintótico (línea roja discontinua).

3. Resultados

En esta sección, se muestran los resultados de aplicar el fundamento teórico introducido en la sección 2 para los estados fundamentales de núcleos de ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$. Se estudian cualitativamente las densidades de probabilidad en diferentes subespacios y se extraen magnitudes de interés que permiten comparar estos núcleos entre sí y con la literatura.

Dado que las densidades de probabilidad serán la herramienta fundamental para visualizar las propiedades estudiadas, necesitaremos conocer las funciones de onda y tratarlas adecuadamente. Las partes hiperradiales de estas, $\chi_\beta^{\nu j}(\rho)$, no se calculan en este trabajo. En ambos casos (${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$), son facilitadas por los tutores, siendo calculadas mediante un programa que hace uso del método de los pseudoestados [1]. La interacción *core*-neutrón en ${}^6\text{He}$ está ajustada para describir la resonancia $p_{3/2}$ en el subsistema no ligado ${}^5\text{He}$ [7, 17, 18], mientras que en ${}^{11}\text{Li}$ está ajustada según se indica en la referencia [19], basándose en los parámetros de Thompson y Zhukov [17]. En ambos casos, la interacción neutrón-neutrón se modela utilizando el potencial GPT [20].

La parte práctica, que sí forma parte de este trabajo, comienza con 66 canales para ${}^6\text{He}$ y 136 canales para ${}^{11}\text{Li}$. El número de canales viene directamente limitado por K_{max} . Tanto K_{max} como i_{max} son los valores (finitos) más pequeños que ofrecen una convergencia adecuada de la función de onda y la energía del núcleo [1]. No es arbitrario, por tanto, que se parta de un número diferente de canales para ${}^6\text{He}$ y ${}^{11}\text{Li}$.

De cada uno de los canales, β , se dan como datos sus números cuánticos y su función hiperradial. Para cada uno de los núcleos, el esquema de trabajo que se ha seguido es el siguiente:

- Ordenar los canales, β , en conjuntos de canales, γ , que tienen todos los números cuánticos comunes excepto K .
- Calcular los polinomios de Jacobi ($P_n^{l_x+1/2, l_y+1/2}$) (ecuación (37)), y constantes de normalización ($N_K^{l_x l_y}$) (ecuación (38)) para generar las funciones $\varphi_K^{l_x l_y}$ (ecuación (36)).
- Construir una malla que genere el plano (r_x, r_y) de una forma coherente con los

valores conocidos de $\chi_p^{\nu j}(\rho)$, y que permita calcular la densidad de probabilidad (total y de cada uno de los conjuntos de canales, γ) en este plano.

- Generar las densidades de probabilidad hiperradiales (total y de cada uno de los canales, β).
- Integrar adecuadamente la densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y) para calcular las densidades de probabilidad asociadas a r_x y r_y .
- Calcular probabilidades, valores medios y parámetros de interés a partir de las densidades de probabilidad obtenidas, así como comprobar que las funciones de onda están normalizadas.

3.1. Estado fundamental de ${}^6\text{He}$ (0^+)

Funciones y densidades hiperradiales. Se representan las funciones hiperradiales de los canales de mayor contribución a la norma en la figura 5. La densidad de probabilidad hiperradial total se muestra en la figura 6, junto a las densidades de probabilidad hiperradiales parciales correspondientes a los canales (β) con mayor contribución. Es conveniente recordar que la densidad hiperradial total puede expresarse como una suma de densidades de probabilidad de cada canal a través de la ecuación (85). Los canales de mayor contribución se presentan en la tabla 2. A partir del conjunto de ecuaciones (98) se pueden obtener el hiperradio medio, la raíz cuadrada del hiperradio cuadrático medio

K	l_x	l_y	l	S_x	j_{ab}	$Norma$ (%)
2	0	0	0	0	0	78,6
2	1	1	1	1	0	12,2
0	0	0	0	0	0	4,9
6	2	2	0	0	0	1,5

Tabla 2: Canales (β) con contribución superior al 1% la norma para ${}^6\text{He}$.

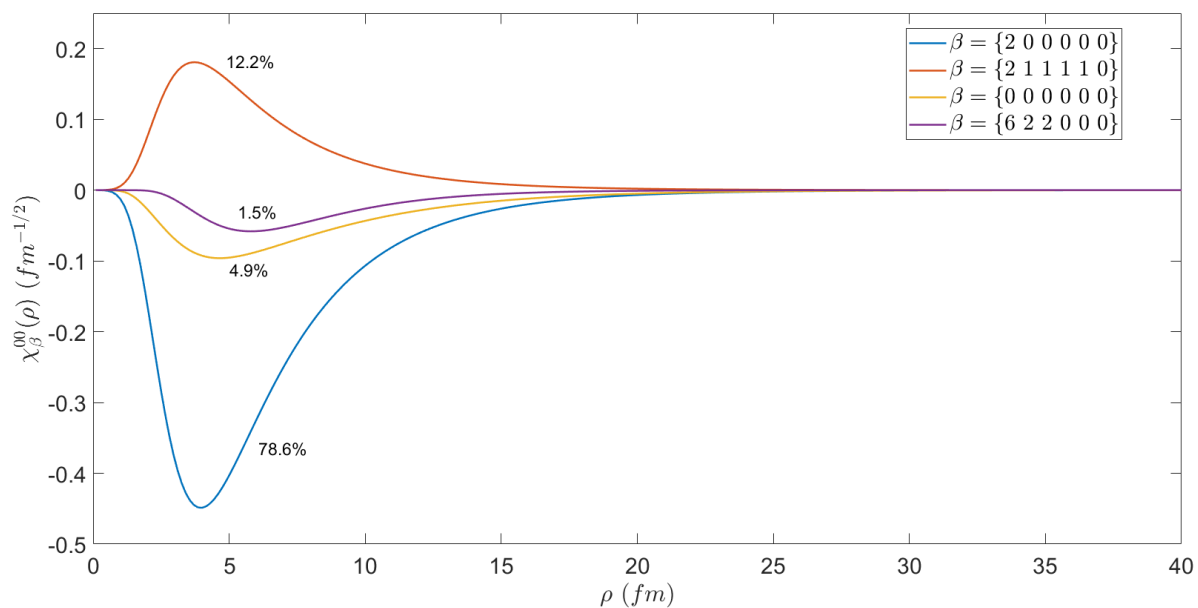


Figura 5: Funciones hiperradiales de los canales (β) con mayor contribución a la norma para ${}^6\text{He}$ (líneas continuas).

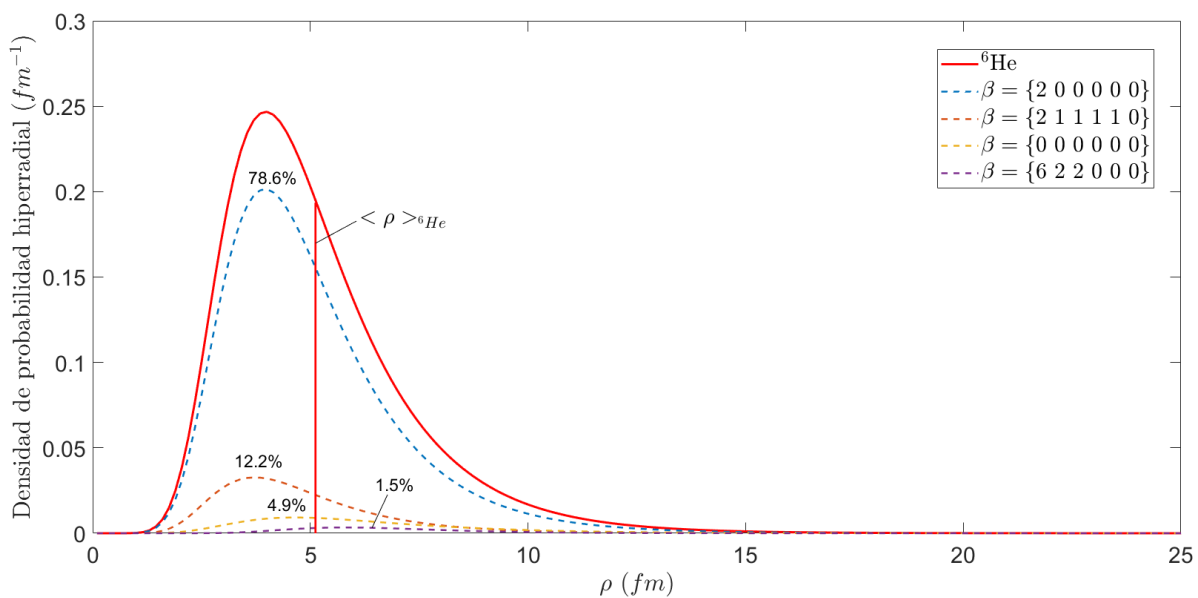


Figura 6: Densidad de probabilidad hiperradial total (línea continua roja) y densidades parciales asociadas a los canales (β) con mayor contribución a la norma (líneas discontinuas) para ${}^6\text{He}$.

y la desviación típica del hiperradio:

$$\langle \rho \rangle = 5,12 \text{ fm}, \quad (104a)$$

$$\langle \rho^2 \rangle^{1/2} = 5,53 \text{ fm}, \quad (104b)$$

$$\Delta \rho = 2,10 \text{ fm}, \quad (104c)$$

que son magnitudes relacionadas con el radio de materia del núcleo [1].

Densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y) . La densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y) del estado fundamental de ${}^6\text{He}$ se muestra en la figura 7. Esta densidad de probabilidad puede entenderse como una suma de las densidades de probabilidad asociadas a cada uno de los conjuntos de canales (γ) , como se indica en la ecuación (91). Es posible calcular la contribución a la norma de cada uno de estos conjuntos de canales integrando en el plano las densidades de probabilidad parciales correspondientes. En la tabla 3 se muestran los conjuntos con contribución superior al 1% de la norma total. Se puede observar concordancia con la tabla 2: los canales (β) de mayor contribución pertenecen a los conjuntos (γ) más relevantes. Asimismo, estas densidades de probabilidad parciales se muestran en la figura 9 (con la misma escala de color para comparar adecuadamente).

Se puede apreciar que el conjunto $\gamma = \{0, 0, 0, 0, 0\}$ predomina y que su densidad de probabilidad parcial es cualitativamente muy similar a la densidad de probabilidad total. El conjunto $\gamma = \{2, 2, 0, 0, 0\}$ no se representa porque, manteniendo la escala de color, no es apreciable (2,4% de la norma).

La densidad de probabilidad sólo es distinta de cero en un rango relativamente pequeño de valores de (r_x, r_y) . En la figura 7 se observan dos zonas del espacio con densidad de probabilidad considerable. Se identifican dos picos que se pueden asignar a configuracio-

l_x	l_y	l	S_x	j_{ab}	Norma (%)
0	0	0	0	0	84,0
1	1	1	1	0	12,4
2	2	0	0	0	2,4

Tabla 3: Conjuntos (γ) de canales con contribución superior al 1% la norma (${}^6\text{He}$).

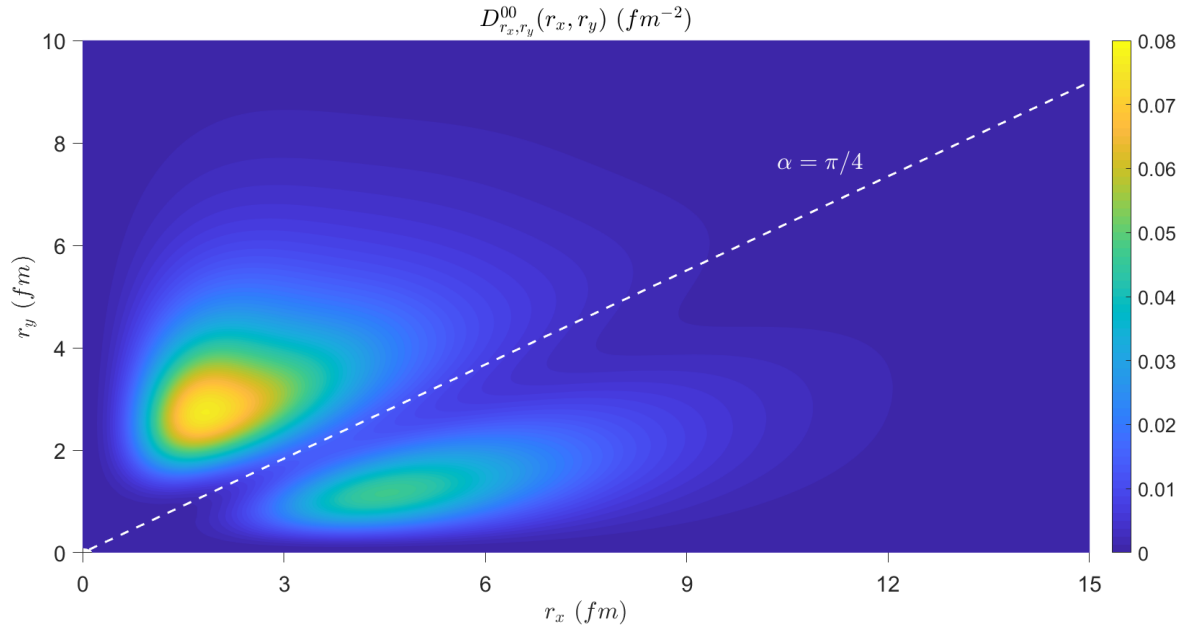


Figura 7: Densidad de probabilidad total en el plano (r_x, r_y) para ${}^6\text{He}$. Línea blanca discontinua marcando la recta $\alpha = \pi/4$

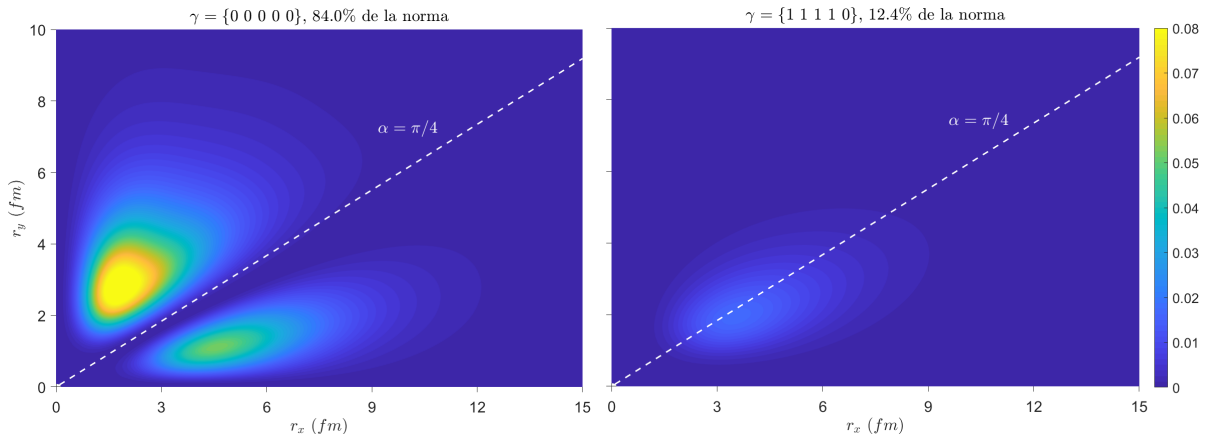


Figura 8: Densidades de probabilidad parciales en el plano (r_x, r_y) asociadas a los dos conjuntos γ con mayor contribución a la norma para ${}^6\text{He}$. Líneas blancas discontinuas marcando las rectas $\alpha = \pi/4$

nes dineutrón ($x \leq y$) y *cigar-like* ($x > y$). Modelar estos picos por separado e integrarlos podría ser una forma de calcular las probabilidades de dineutrón y *cigar-like*. Sin embargo, parte del pico de dineutrón penetra en la zona de *cigar-like*, y viceversa. Para determinar las probabilidades de dineutrón (P_d) y *cigar-like* (P_c) es conveniente adherirse a las definiciones del conjunto de ecuaciones (97). Así, estas probabilidades se obtienen integrando en dos zonas complementarias del plano por separado. Para visualizar que los picos de dineutrón y *cigar-like* se solapan y penetran en las zonas opuestas, se representa la densidad de probabilidad, $D_{r_x r_y}^{00}(r_x, r_y)$, en tres dimensiones y separando el plano en las dos secciones de interés (Figura 9).

Las probabilidades de dineutrón y *cigar-like* calculadas integrando la densidad en estas regiones son:

$$P_d = 0,65, \quad (105a)$$

$$P_c = 0,35, \quad (105b)$$

$$\eta = 0,30. \quad (105c)$$

Se puede comprobar que el estado fundamental de ${}^6\text{He}$ presenta una configuración mayoritariamente dineutrón, al ser $\eta > 0$ ($P_d > P_c$).

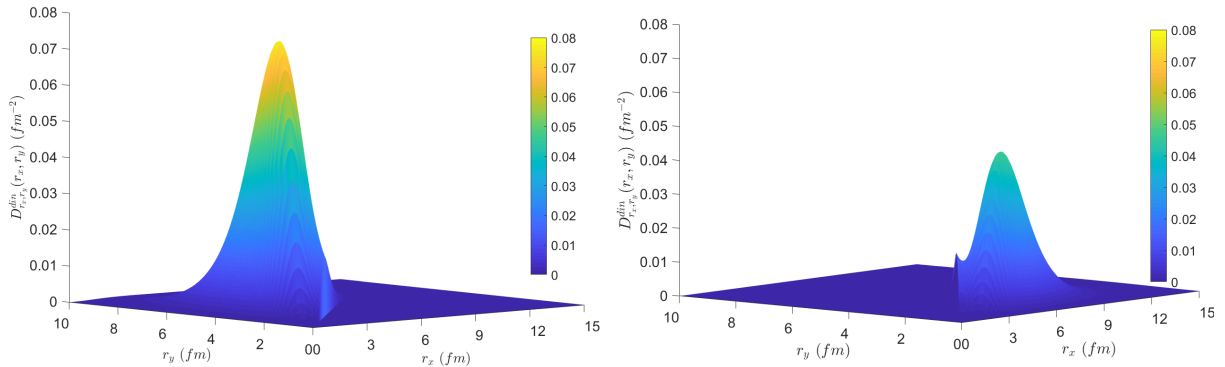


Figura 9: Comparativa de la densidad de probabilidad en las regiones dineutrón (izquierda) y *cigar-like* en el plano (r_x, r_y) para ${}^6\text{He}$.

Densidad de probabilidad asociada a la distancia *core*-dineutrón (r_y). La densidad de probabilidad asociada a r_y para ${}^6\text{He}$ se muestra en la figura 10.

Utilizando expresiones análogas a las del conjunto de ecuaciones (98) se pueden calcular (para el sistema *core*-dineutrón de ${}^6\text{He}$) el radio medio, la raíz cuadrada del radio

cuadrático medio y la desviación típica del radio:

$$\langle r_y \rangle = 3,27 \text{ fm}, \quad (106a)$$

$$\langle r_y^2 \rangle^{1/2} = 3,76 \text{ fm}, \quad (106b)$$

$$\Delta r_y = 1,86 \text{ fm}. \quad (106c)$$

Se puede estimar la energía de ligadura efectiva del sistema *core*-dineutrón de ${}^6\text{He}$ mediante un procedimiento análogo al que se ha llevado a cabo para el deuterón en la sección 2.5. La representación del logaritmo de la densidad de probabilidad y el ajuste lineal análogo a la ecuación (102) se muestran en la figura 11. Nótese que la recta de regresión se representa para todo el dominio de la gráfica, pero sólo se ajusta a $\log(D_{r_y}(r_y))$ para el intervalo $r_y \in [10, 25]$ fm. Este es un intervalo en el que se estima que la densidad de probabilidad ya presenta su comportamiento asintótico teórico, pero no se adentra en la zona en la que existen más desviaciones. Estas desviaciones se producen debido a que se ha truncado la base. Aumentar el tamaño de esta ofrecería una descripción adecuada a distancias mayores.

A partir de la pendiente de la recta de mejor ajuste, utilizando la ecuación (103), se puede calcular la energía de ligadura efectiva asociada a r_y :

$$\varepsilon_y = (1,38 \pm 0,04) \text{ MeV}. \quad (107)$$

La incertidumbre de ε_y es el resultado de propagar linealmente la incertidumbre asociada al intervalo de 95 % de confianza de la pendiente de la recta de regresión lineal. Es conveniente aclarar que todos los valores de energía de ligadura efectiva que se mostrarán en esta memoria, a excepción de $\varepsilon_x^{2\text{H}}$, que puede calcularse analíticamente, llevan asociada una incertidumbre calculada de esta forma. Adicionalmente, las rectas de mejor ajuste de las que se obtienen las pendientes tienen un coeficiente de correlación de Pearson tal que $R^2 \geq 0,9994$ en todos los casos.

La energía de ligadura efectiva de ${}^6\text{He}$ es $\varepsilon_y = 1,38 \text{ MeV} \approx 1,6 \text{ MeV}$, que se obtiene en la referencia [21] como un valor adecuado de la energía de ligadura de un modelo $\alpha + \text{dineutrón}$ para reproducir los resultados de un cálculo realista de tres cuerpos en el caso de ${}^6\text{He}$.

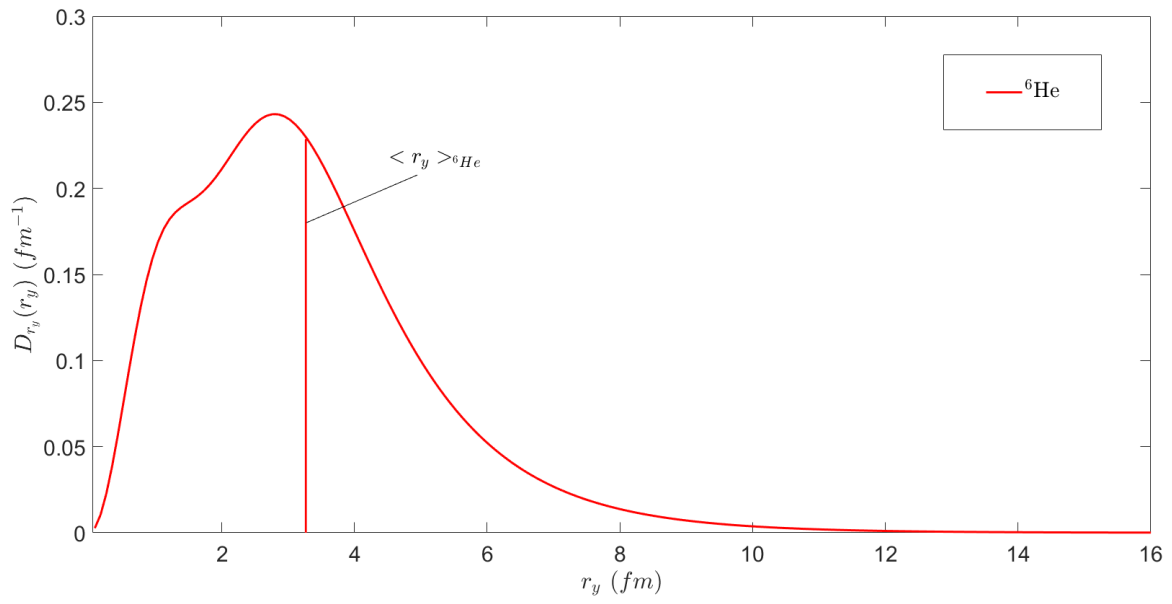


Figura 10: Densidad de probabilidad asociada a r_y para ${}^6\text{He}$ (línea roja continua).

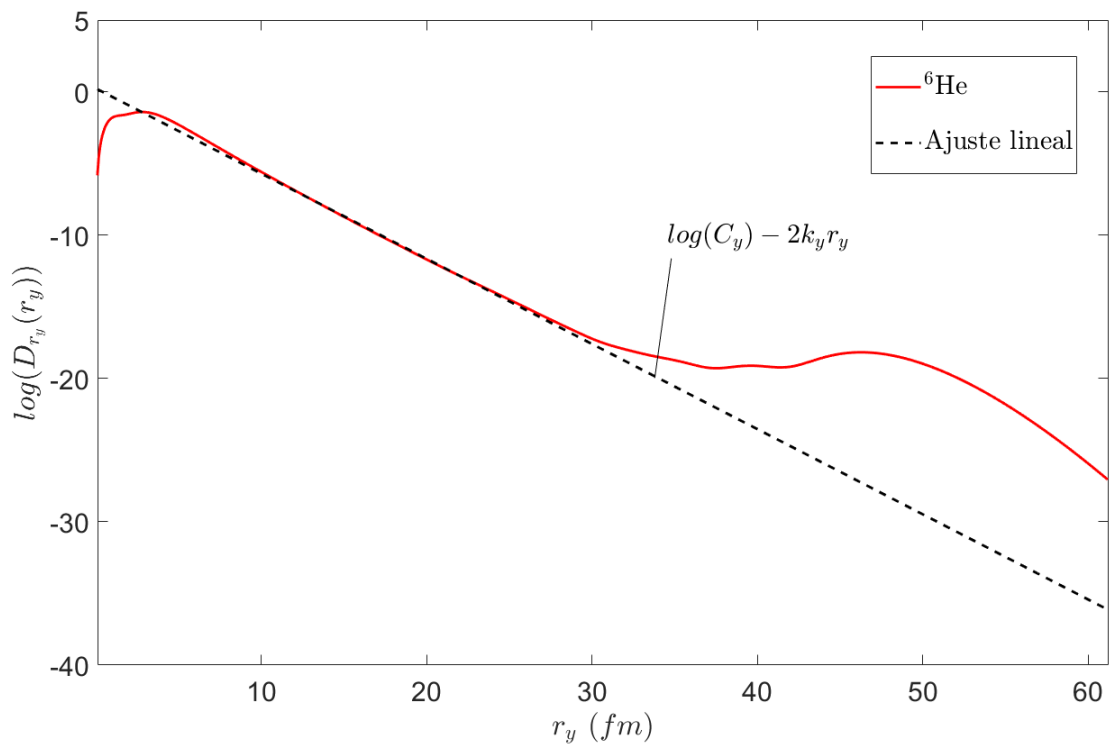


Figura 11: Logaritmo en base e de la densidad de probabilidad asociada a r_y para ${}^6\text{He}$ (línea roja continua). Ajuste lineal (línea negra discontinua).

Densidad de probabilidad asociada a la distancia neutrón-neutrón (r_x). La densidad de probabilidad asociada a r_x para ${}^6\text{He}$ se muestra en la figura 12. Empleando las mismas herramientas que para la coordenada r_y , se pueden obtener, para el subsistema neutrón-neutrón, el radio medio, la raíz cuadrada del radio cuadrático medio, la desviación típica del radio y la energía de ligadura efectiva:

$$\langle r_x \rangle = 4,15 \text{ fm}, \quad (108a)$$

$$\langle r_x^2 \rangle^{1/2} = 4,85 \text{ fm}, \quad (108b)$$

$$\Delta r_x = 2,52 \text{ fm}, \quad (108c)$$

$$\varepsilon_x = (2,47 \pm 0,12) \text{ MeV}. \quad (108d)$$

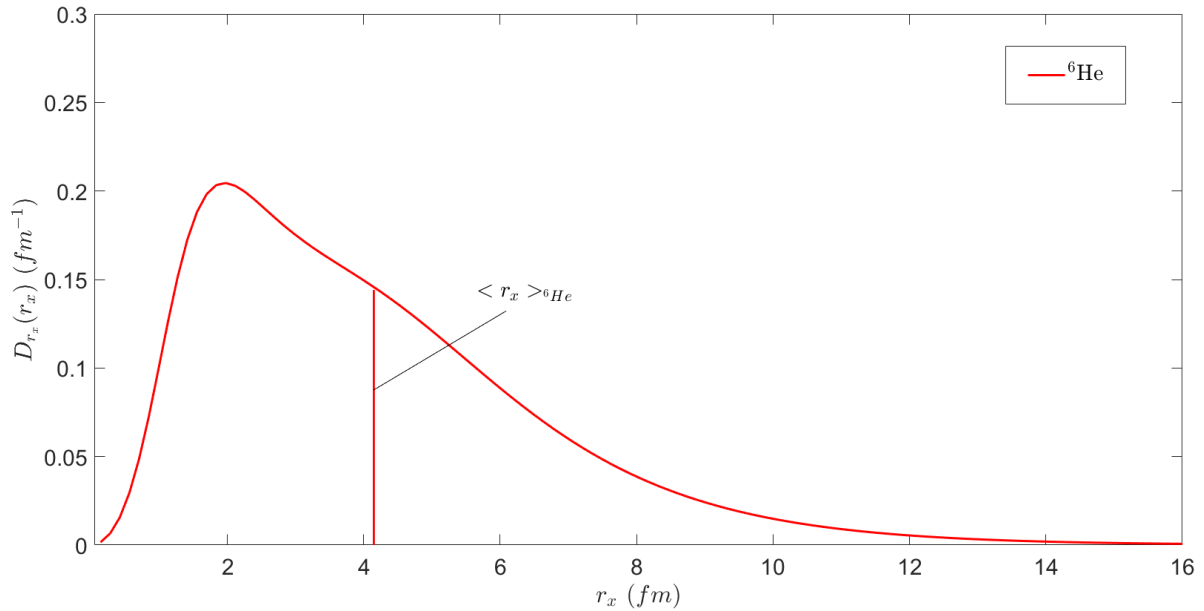


Figura 12: Densidades de probabilidad asociadas a r_x para ${}^6\text{He}$ (línea roja continua).

3.2. Estado fundamental de ${}^{11}\text{Li}$ (0^+)

Funciones y densidades hiperradiales. En la figura 13 se muestran las funciones hiperradiales más relevantes de ${}^{11}\text{Li}$. La densidad de probabilidad hiperradial de ${}^{11}\text{Li}$ se presenta en la figura 14, junto con la de los canales de mayor contribución y la de ${}^6\text{He}$. Asimismo, en la tabla 4 se listan sus canales (β) junto con el porcentaje de la norma que aportan. En la tabla 5 se muestra una comparativa de ${}^{11}\text{Li}$ y ${}^6\text{He}$ en cuanto al

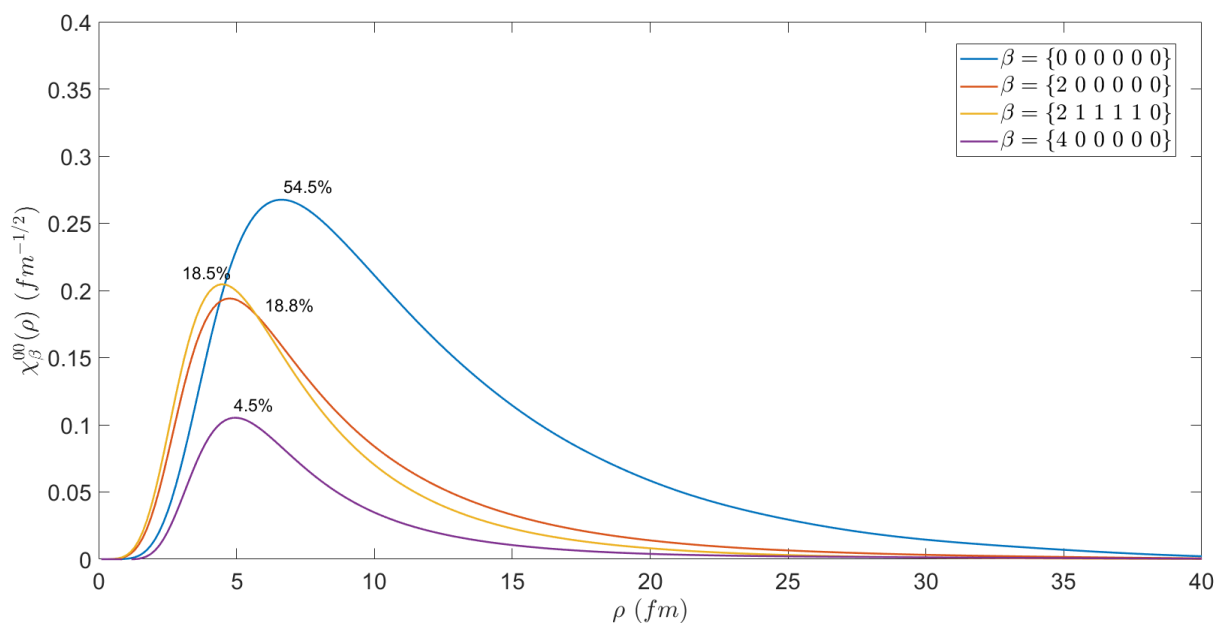


Figura 13: Funciones de onda hiperradiales asociadas a los canales (β) con mayor contribución a la norma del estado fundamental de ^{11}Li .

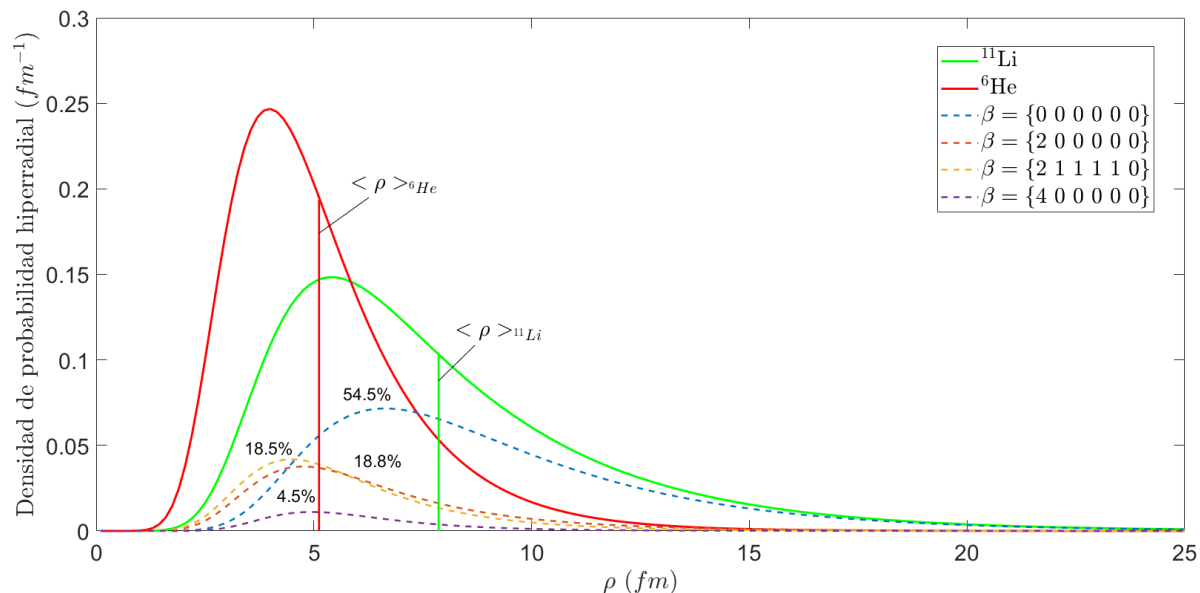


Figura 14: Densidad de probabilidad hiperradial total (línea verde continua) y densidades parciales asociadas a los canales (β) con mayor contribución a la norma (líneas discontinuas) del estado fundamental de ^{11}Li . Comparación con la densidad de probabilidad hiperradial de ^6He (línea roja continua).

hiperradio medio, la raíz cuadrada del hiperradio cuadrático medio y la desviación típica del hiperradio.

K	l_x	l_y	l	S_x	j_{ab}	$Norma$ (%)
0	0	0	0	0	0	54,5
2	0	0	0	0	0	18,8
2	1	1	1	1	0	18,5
4	0	0	0	0	0	4,5

Tabla 4: Canales (β) con contribución superior al 1% la norma (^{11}Li).

	^{11}Li	^6He
$\langle \rho \rangle$ (fm)	7,87	5,12
$\langle \rho^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	8,76	5,53
$\Delta \rho$ (fm)	3,86	2,10

Tabla 5: Hiperradio medio ($\langle \rho \rangle$), raíz cuadrada del hiperradio cuadrático medio ($\langle \rho^2 \rangle^{1/2}$) y desviación típica del hiperradio ($\Delta \rho$) para ^{11}Li y ^6He .

Densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y). La densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y) se muestra en la figura 15. Nótese que se utiliza la misma escala de colores y los mismo límites en los ejes vertical y horizontal que en el caso de ^6He para comparar las distribuciones adecuadamente.

Se observa que la densidad de probabilidad en este plano para ^{11}Li presenta máximos mucho menores y es mucho más extensa que para ^6He . Como consecuencia, es de esperar que las distancias neutrón-neutrón y *core*-neutrón sean mayores que en el caso de ^6He . Integrar las densidades de probabilidad parciales revela que los conjuntos de canales γ de mayor contribución a la norma son los mismos que en el caso de ^6He : $\gamma = \{0, 0, 0, 0, 0\}$, con un 78,4%, $\gamma = \{1, 1, 1, 1, 0\}$, 19,3%, y $\gamma = \{2, 2, 0, 0, 0\}$, con una contribución inferior al 1%.

Al igual que para ^6He , se pueden distinguir dos máximos, correspondientes a las configuraciones dineutrón ($y \geq x$) y *cigar-like* ($y < x$). Integrar la densidad de probabilidad

en estas regiones permite calcular las probabilidades de ambas configuraciones, así como el parámetro η . Los tres valores se muestran en la tabla 6, junto a los de ${}^6\text{He}$. Se puede observar que ${}^{11}\text{Li}$ presenta mayor probabilidad de dineutrón. Esto se puede relacionar con el hecho de que en ${}^{11}\text{Li}$ hay más mezcla de configuraciones, lo cual favorece la formación del dineutrón [22]. De hecho en ${}^6\text{He}$ se espera que predomine $p_{3/2}$, mientras que en ${}^{11}\text{Li}$ hay mezcla de $1p_{1/2}$ y $2s_{1/2}$.

	${}^{11}\text{Li}$	${}^6\text{He}$
P_d	0,76	0,65
P_c	0,24	0,35
η	0,52	0,30

Tabla 6: Probabilidad de dineutrón (P_d), probabilidad de *cigar-like* (P_c) y parámetro η para ${}^{11}\text{Li}$ y ${}^6\text{He}$.

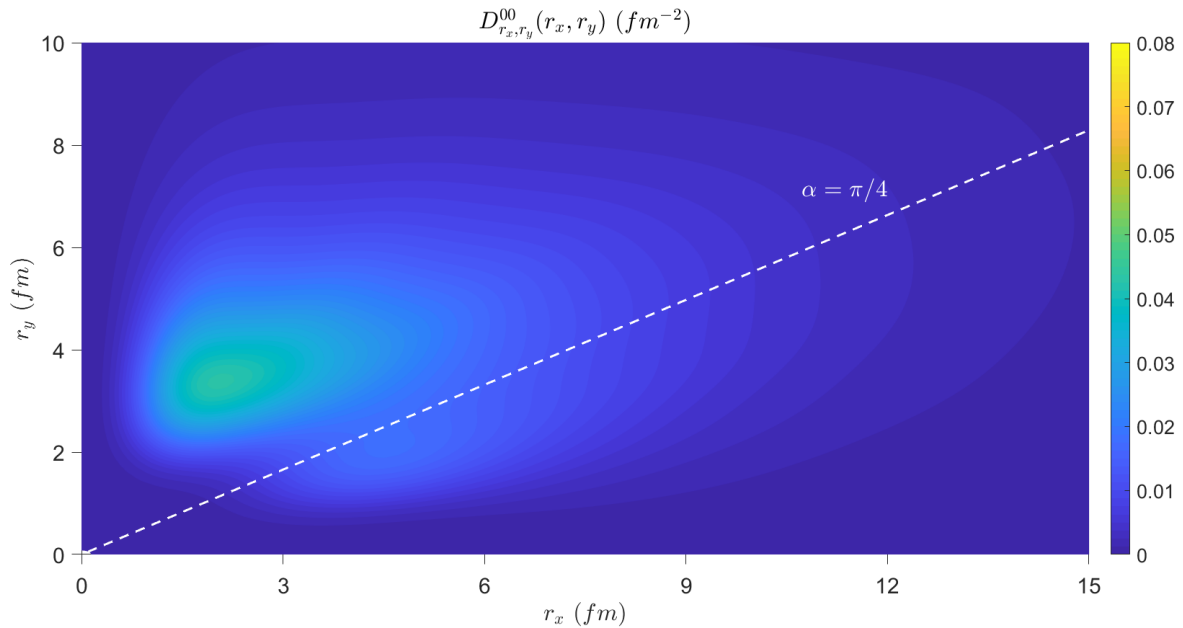


Figura 15: Densidad de probabilidad en el plano (r_x, r_y) para ${}^{11}\text{Li}$. Línea blanca discontinua indicando la recta $\alpha = \pi/4$.

Densidad de probabilidad asociada a la distancia *core-dineutrón* (r_y). La densidad de probabilidad asociada a r_y para ${}^{11}\text{Li}$ se representa junto a la de ${}^6\text{He}$ en la figura 16. A partir de estas funciones se pueden calcular el radio medio, la raíz cuadrada del

radio cuadrático medio, la desviación típica del radio y la energía de ligadura efectiva del sistema *core*-dineutrón. Se comparan estos valores para ^{11}Li y ^6He en la tabla 7.

	^{11}Li	^6He
ε_y (MeV)	$0,529 \pm 0,012$	$1,38 \pm 0,04$
$\langle r_y \rangle$ (fm)	4,94	3,27
$\langle r_y^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	5,58	3,76
Δr_y (fm)	2,60	1,86

Tabla 7: Energía (ε_y), radio medio ($\langle r_y \rangle$), raíz cuadrada del radio cuadrático medio ($\langle r_y^2 \rangle^{1/2}$) y desviación típica del radio (Δr_y) asociados al subsistema *core*-dineutrón. Comparación de ^{11}Li y ^6He .

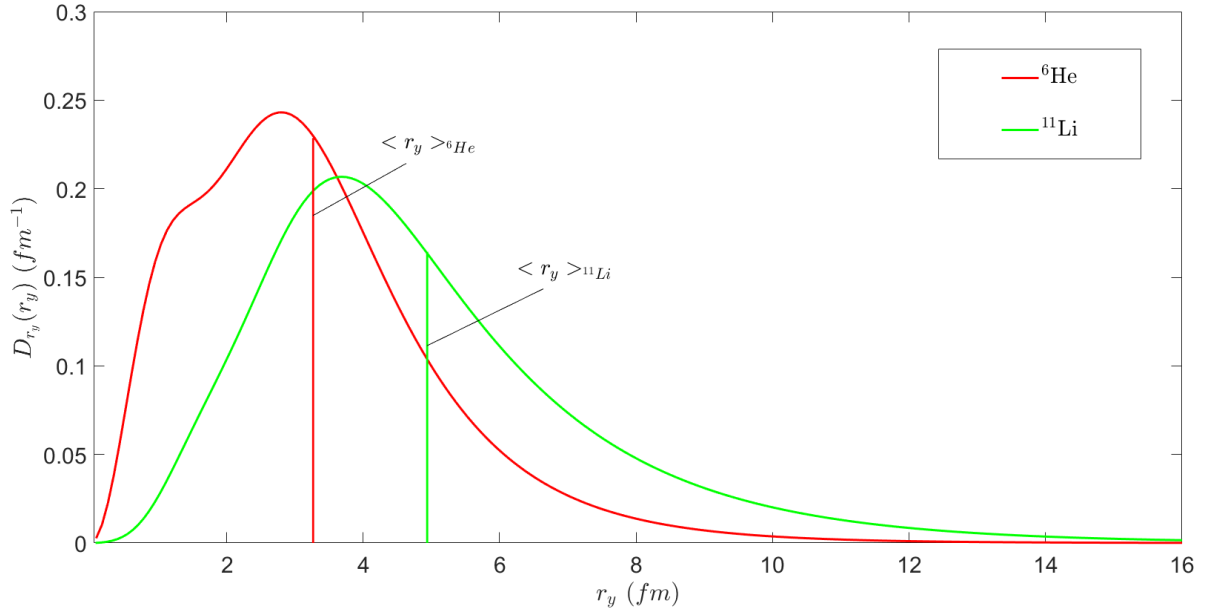


Figura 16: Densidades de probabilidad asociadas a r_y para ^{11}Li (línea verde continua) y ^6He (línea roja continua).

Densidad de probabilidad asociada a la distancia neutrón-neutrón (r_x). La densidad de probabilidad asociada a r_x para ^{11}Li se representa junto a las de ^6He y ^2H en la figura 17. Conviene recordar que la coordenada r_x en los casos de ^6He y ^{11}Li , indica la distancia neutrón-neutrón, mientras que para ^2H , expresa la distancia protón-neutrón. A partir de estas funciones se pueden calcular el radio medio, la raíz cuadrada del radio

cuadrático medio, la desviación típica del radio y la energía de ligadura efectiva de los sistemas mencionados. Se comparan estos valores para los tres núcleos en la tabla 8.

Puede observarse que la función densidad de probabilidad de ^{11}Li es más extensa que la de ^6He , que a su vez es más extensa que la de ^2H . Esto es de esperar, pues ^{11}Li está mucho menos ligado que ^6He , y este menos que el deuterón. Los datos de la tabla 8 indican que las densidades de probabilidad más extensas se corresponden con un mayor radio cuadrático medio. Sin embargo, las energías de ligadura (para los sistemas neutrón-neutrón o protón-neutrón según corresponda) no pueden ordenarse de la misma forma: se observa que ^6He tiene una energía de ligadura efectiva ligeramente superior a la de ^2H , y que la de ^{11}Li es significativamente inferior: el subsistema neutrón-neutrón en ^{11}Li es mucho menos ligado que el neutrón-neutrón de ^6He y que el protón-neutrón de ^2H . Esto es importante para entender la diferencia en las configuraciones dineutrón de ^{11}Li y ^6He . A pesar de que ^{11}Li tiene una mayor probabilidad de dineutrón, se trata de una estructura menos compacta.

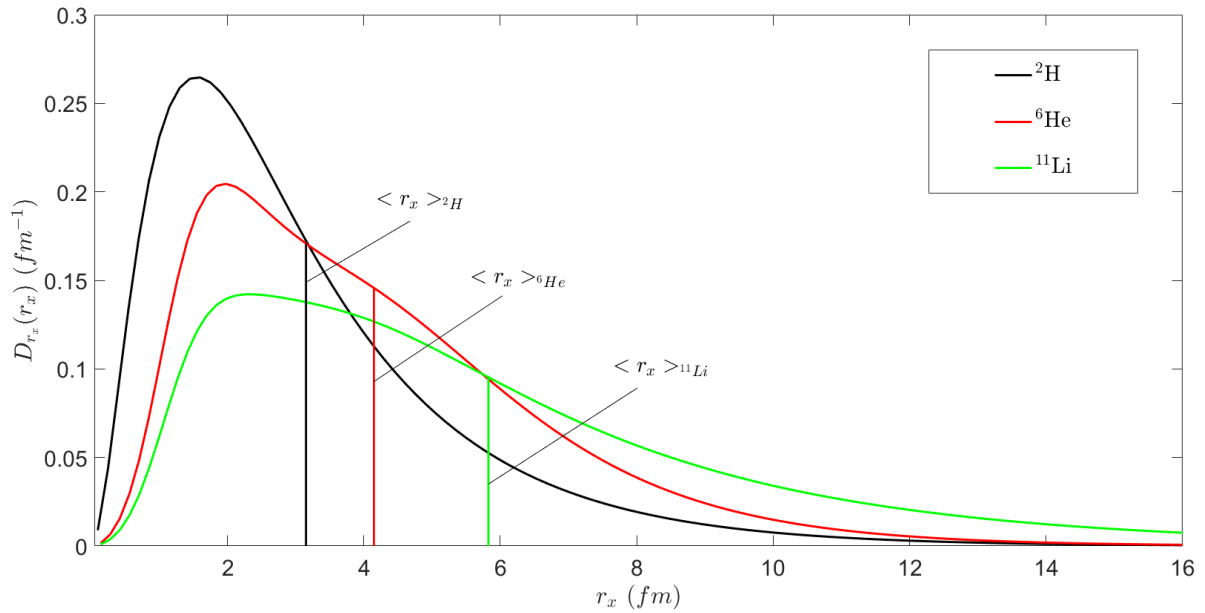


Figura 17: Densidades de probabilidad asociadas a r_x para ^{11}Li (línea verde continua), ^6He (línea roja continua) y ^2H (línea negra continua).

	^{11}Li	^6He	^2H
ε_x (MeV)	$0,600 \pm 0,005$	$2,47 \pm 0,12$	2,242
$\langle r_x \rangle$ (fm)	5,83	4,15	3,15
$\langle r_x^2 \rangle^{1/2}$ (fm)	7,19	4,85	3,88
Δr_x (fm)	4,21	2,52	2,27

Tabla 8: Energía (ε_x), radio medio ($\langle r_x \rangle$), raíz cuadrada del radio cuadrático medio ($\langle r_x^2 \rangle^{1/2}$) y desviación típica del radio (Δr_x) asociados al subsistema neutrón-neutrón. Comparación de ^{11}Li , ^6He y ^2H .

4. Resumen y conclusiones

Se han completado satisfactoriamente los objetivos del trabajo. Se ha explicado brevemente el método de los armónicos hiperesféricos para resolver un problema de tres cuerpos. A continuación, se han desarrollado las relaciones necesarias para expresar las densidades de probabilidad de un autoestado del hamiltoniano pasando de coordenadas hiperesféricas a las coordenadas relativas entre los tres cuerpos. Las funciones de onda de partida se han tratado adecuadamente para calcular las densidades de probabilidad y observables de interés de ^6He y ^{11}Li .

A partir de las densidades de probabilidad hiperradiales se han podido calcular los hiperradios medios ($\langle \rho \rangle$), las raíces cuadradas de los hiperradios cuadráticos medios ($\langle \rho^2 \rangle^{1/2}$) y las desviaciones típicas de los hiperradios ($\Delta \rho$). La raíz cuadrada del hiperradio cuadrático medio ha resultado mayor en el caso de ^{11}Li ($\langle \rho^2 \rangle_{^{11}\text{Li}}^{1/2} = 8,76$ fm), lo que apunta a que su radio de materia es mayor que el de ^6He ($\langle \rho^2 \rangle_{^6\text{He}}^{1/2} = 5,53$ fm), como era de esperar, ya que ^{11}Li es menos ligado que ^6He . Integrar las densidades de probabilidad hiperradiales parciales ha permitido distinguir los canales con mayor contribución a la norma. Para ambos núcleos, los conjuntos de canales de mayor contribución a la norma del estado fundamental de cada núcleo son aquellos de menor l_x y l_y : $\gamma = \{0, 0, 0, 0, 0\}$ (84,0% de la norma para ^6He y 78,4% para ^{11}Li) y $\gamma = \{1, 1, 1, 1, 0\}$ (12,4% para ^6He y 19,3% para ^{11}Li).

Las densidades de probabilidad en el plano (r_x, r_y) presentan dos máximos. Uno de ellos

se corresponde con una configuración llamada dineutrón, en la que la distancia neutrón-neutrón es pequeña en comparación a la distancia *core*-dineutrón, mientras que el otro se corresponde con la configuración opuesta, denominada *cigar-like*. Se han comparado las probabilidades de ambas configuraciones en los núcleos estudiados y, a partir de estas probabilidades, se ha definido el parámetro η . Este es de 0,52 para ^{11}Li y de 0,30 para ^6He . Dado que $\eta_{^{11}\text{Li}} > \eta_{^6\text{He}} > 0$ se puede concluir que el estado fundamental de ^{11}Li presenta mayor probabilidad de dineutrón que el de ^6He y que, en ambos, la configuración dineutrón es más probable que la *cigar-like*.

De las densidades de probabilidad asociadas a r_x y r_y por separado, se han obtenido los radios medios ($\langle r_x \rangle$, $\langle r_y \rangle$), las raíces cuadradas de los radios cuadráticos medios ($\langle r_x^2 \rangle^{1/2}$, $\langle r_y^2 \rangle^{1/2}$) y desviaciones típicas de los radios (Δr_x , Δr_y) asociados a los sistemas neutrón-neutrón y *core*-dineutrón respectivamente. Los resultados indican que todas estas magnitudes son mayores en el caso de ^{11}Li ($\langle r_x^2 \rangle_{^{11}\text{Li}}^{1/2} = 7,19$ fm, $\langle r_y^2 \rangle_{^{11}\text{Li}}^{1/2} = 5,58$ fm) que en el caso de ^6He ($\langle r_x^2 \rangle_{^6\text{He}}^{1/2} = 4,85$ fm, $\langle r_y^2 \rangle_{^6\text{He}}^{1/2} = 3,76$ fm). Los valores asociados al subsistema neutrón-neutrón (coordenada r_x) de ambos núcleos se han comparado con el deuterón (^2H), en el que r_x se refiere a la distancia protón-neutrón. Se observa que los valores del deuterón ($\langle r_x^2 \rangle_{^2\text{H}}^{1/2} = 3,88$ fm) para el radio medio, raíz cuadrada del radio cuadrático medio y desviación típica del radio son menores que los de ^{11}Li y ^6He .

Adicionalmente, a partir del comportamiento asintótico de las densidades de probabilidad en r_x y r_y por separado, se han calculado energías de ligadura efectivas (ε_x , ε_y) asociadas a los sistemas mencionados. Como resultado, se ha obtenido que $\varepsilon_y^{^6\text{He}} > \varepsilon_y^{^{11}\text{Li}}$, y que $\varepsilon_x^{^6\text{He}} > \varepsilon_x^{^2\text{H}} > \varepsilon_x^{^{11}\text{Li}}$.

En general, se observa que, para todos los subespacios estudiados, las densidades de probabilidad de ^{11}Li son más extensas que las de ^6He y ^2H , lo que se traduce en un mayor radio de materia, mayores distancias neutrón-neutrón y *core*-dineutrón, y menores energías de ligadura efectivas.

Bibliografía

- [1] Jesús Casal Berbel: *Weakly-bound three-body nuclear systems: structure, reactions and astrophysical implications*. 2016.
- [2] I. Tanihata: *Neutron halo nuclei*. Journal of Physics G: Nuclear and Particle Physics, 22:157–198, 1996.
- [3] I. Tanihata, H. Savajols y R. Kanungo: *Recent experimental progress in nuclear halo structure studies*. Progress in Particle and Nuclear Physics, 68:215–313, 2013, ISSN 0146-6410.
- [4] M.V. Zhukov, B.V. Danilin, D.V. Fedorov, J.M. Bang, I.J. Thompson y J.S. Vaagen: *Bound state properties of Borromean halo nuclei: ${}^6\text{He}$ and ${}^{11}\text{Li}$* . Physics Reports, 231:151–199, 1993.
- [5] I. Tanihata, H. Hamagaki, O. Hashimoto, Y. Shida, N. Yoshikawa, K. Sugimoto, O. Yamakawa, T. Kobayashi y N. Takahashi: *Measurements of Interaction Cross Sections and Nuclear Radii in the Light p -Shell Region*. Phys. Rev. Lett., 55:2676–2679, 1985.
- [6] K. Hagino y H. Sagawa: *Pairing correlations in nuclei on the neutron-drip line*. Phys. Rev. C, 72:044321, 2005.
- [7] J. Casal, M. Rodríguez-Gallardo y J. M. Arias: *Analytical transformed harmonic oscillator basis for three-body nuclei of astrophysical interest: Application to ${}^6\text{He}$* . Phys. Rev. C, 88:014327, 2013.
- [8] J. P. Fernández-García, M. Cubero, M. Rodríguez-Gallardo, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Alvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, C. A. Diget, H. A. Falou, B. R. Fulton, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J. A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A. M. Sánchez-Benítez, A. Shotter, O. Tengblad y P. Walden: *${}^{11}\text{Li}$ Breakup on ${}^{208}\text{Pb}$ at Energies Around the Coulomb Barrier*. Phys. Rev. Lett., 110:142701, 2013.
- [9] M. Brodeur, T. Brunner, C. Champagne, S. Ettenauer, M. J. Smith, A. Lapierre, R. Ringle, V. L. Ryjkov, S. Bacca, P. Delheij, G. W. F. Drake, D. Lunney, A. Schwenk

- y J. Dilling: *First Direct Mass Measurement of the Two-Neutron Halo Nucleus ${}^6\text{He}$ and Improved Mass for the Four-Neutron Halo ${}^8\text{He}$* . Phys. Rev. Lett., 108:052504, 2012.
- [10] D.R. Tilley, J.H. Kelley, J.L. Godwin, D.J. Millener, J.E. Purcell, C.G. Sheu y H.R. Weller: *Energy levels of light nuclei $A=8,9,10$* . Nuclear Physics A, 745(3):155–362, 2004, ISSN 0375-9474.
- [11] J.H. Kelley, E. Kwan, J.E. Purcell, C.G. Sheu y H.R. Weller: *Energy levels of light nuclei $A=11$* . Nuclear Physics A, 880:88–195, 2012, ISSN 0375-9474.
- [12] E. Nielsen: *The three-body problem with short-range interactions*. Physics Reports, 347:373–459, 2001.
- [13] M. Cubero, J. P. Fernández-García, M. Rodríguez-Gallardo, L. Acosta, M. Alcorta, M. A. G. Alvarez, M. J. G. Borge, L. Buchmann, C. A. Diget, H. Al Falou, B. R. Fulton, H. O. U. Fynbo, D. Galaviz, J. Gómez-Camacho, R. Kanungo, J. A. Lay, M. Madurga, I. Martel, A. M. Moro, I. Mukha, T. Nilsson, A. M. Sánchez-Benítez, A. Shotter, O. Tengblad y P. Walden: *Do Halo Nuclei Follow Rutherford Elastic Scattering at Energies Below the Barrier? The Case of ${}^{11}\text{Li}$* . Phys. Rev. Lett., 109:262701, 2012.
- [14] F. Pérez-Bernal, I. Martel, J. M. Arias y J. Gómez-Camacho: *Continuum discretization in a basis of transformed harmonic-oscillator states*. Phys. Rev. A, 63:052111, 2001.
- [15] R. J. Adler, T. K. Das y A. F. Filho: *Analytic wave function for the deuteron D state*. Phys. Rev. C, 16:1231–1234, 1977.
- [16] L. Hulthén y M. Sugawara: *The Two-Nucleon Problem*, páginas 1–143. Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 1957.
- [17] I. J. Thompson, B. V. Danilin, V. D. Efros, J. S. Vaagen, J. M. Bang y M. V. Zhukov: *Pauli blocking in three-body models of halo nuclei*. Phys. Rev. C, 61:024318, 2000.
- [18] J. Bang y C. Gignoux: *A realistic three-body model of ${}^6\text{Li}$ with local interactions*. Nuclear Physics A, 313(1):119–140, 1979, ISSN 0375-9474.

- [19] J. Casal, M. Gómez-Ramos y A.M. Moro: *Description of the $^{11}\text{Li}(p,d)^{10}\text{Li}$ transfer reaction using structure overlaps from a full three-body model*. Physics Letters B, 767:307–313, 2017, ISSN 0370-2693.
- [20] D. Gogny, P. Pires y R. De Tourreil: *A smooth realistic local nucleon-nucleon force suitable for nuclear Hartree-Fock calculations*. Physics Letters B, 32(7):591–595, 1970, ISSN 0370-2693.
- [21] A. M. Moro, K. Rusek, J. M. Arias, J. Gómez-Camacho y M. Rodríguez-Gallardo: *Improved di-neutron cluster model for ^6He scattering*. Phys. Rev. C, 75:064607, 2007.
- [22] F. Catara, A. Insolia, E. Maglione y A. Vitturi: *Relation between pairing correlations and two-particle space correlations*. Phys. Rev. C, 29:1091–1094, 1984.