



FACULTAD DE FÍSICA

DEPARTAMENTO DE FÍSICA ATÓMICA, MOLECULAR Y NUCLEAR

Formas de los núcleos atómicos y simetrías dinámicas

UNIVERSIDAD DE SEVILLA

Noé Duarte González

Curso 2022-2023

Doble Grado en Física y Matemáticas

Tutorizado por

Dr. José Antonio Lay Valera
Dr. José Miguel Arias Carrasco



Resumen

El objetivo de este trabajo es estudiar cómo afecta la geometría del núcleo atómico a sus propiedades como sistema cuántico. En concreto, vamos a centrarnos en lo que sucede en la transición entre dos formas bien definidas, y veremos cómo se puede relacionar esta situación con la teoría de transiciones de fase.

El trabajo consta de tres capítulos. En el primero, vamos a introducir las propiedades fundamentales del núcleo atómico y vamos a presentar los dos modelos de estructura nuclear con los que trabajaremos: el modelo de Bohr-Mottelson y el modelo de bosones en interacción (IBM). Además, haremos un recordatorio de los resultados esenciales de la teoría clásica de transiciones de fase y discutiremos cómo se puede trasladar a sistemas puramente cuánticos.

En el segundo capítulo, introduciremos el caso concreto que vamos a estudiar en el trabajo, el punto crítico $E(5)$. Plantearemos este estado del núcleo dentro del modelo de Bohr-Mottelson como una situación en la que el potencial del núcleo tiene la forma de pozo infinito en la variable de deformación de la superficie β . Para su estudio, hemos desarrollado códigos de MATLAB para visualizar las soluciones analíticas del problema y obtener las probabilidades de transición entre algunos estados relevantes. También veremos cómo conectar esta situación con el IBM en su límite clásico, donde obtendremos una dependencia de la energía de la forma $E(\beta) = \beta^4$. Completaremos este capítulo con una resolución numérica propia con MATLAB del potencial β^4 en el modelo de Bohr.

Por último, en el tercer capítulo, aplicaremos estos modelos teóricos al estudio de la cadena de isótopos del rutenio, comparando con los datos experimentales. Usaremos estos resultados para encontrar qué isótopo se corresponde con el punto crítico planteado mediante el cálculo de observables experimentales, como las energías o las probabilidades de transición entre estados.

Abstract

The aim of this project is to study how the geometry of the atomic nucleus affects its properties as a quantum system. More precisely, we will focus on what happens during the transition between two well-defined shapes and we will see how we can relate that state with the theory of phase transitions.

This project is divided in three chapters. In the first one, we will introduce the main properties of the atomic nucleus, as well as developing the nuclear structure models we will use: the Bohr-Mottelson model, and the interacting boson model (IBM). Apart from that, there will be a reminder of the essential results of the classic theory of phase transitions, and we will also discuss how those results can be translated to purely quantum systems.

In the second chapter, we will introduce the particular case we are studying in this project, the critical point $E(5)$. We will propose this state of the nucleus within the Bohr-Mottelson model, as a situation in which the potential energy of the nucleus has an infinite well shape in the surface deformation variable β . For its study, we have developed several MATLAB codes which allow us to both visualize the analytical solutions of the problem and obtain the transition probabilities between some relevant states. We will also study how we can connect this situation with the IBM in its classical limit, where we will get an energy dependence of the form $E(\beta) = \beta^4$. We will complete the chapter with our own numerical resolution of the β^4 potential for the Bohr model with MATLAB.

Lastly, in the third chapter, we will apply these theoretical models to study the isotopic chain of ruthenium, comparing these results with the experimental data. We will use this to find the isotope which corresponds to the proposed critical point, by calculating experimental observables such as energy or transition probabilities between states.



Índice general

1. Introducción	9
1.1. El núcleo atómico	9
1.2. El modelo de Bohr-Mottelson	11
1.2.1. Descripción geométrica de la superficie nuclear	11
1.2.2. Ecuación de Schrödinger para las vibraciones y rotaciones superficiales	13
1.3. El modelo de bosones en interacción (IBM)	15
1.3.1. Motivación del modelo	15
1.3.2. Formalismo del IBM: operadores y observables	16
1.3.3. Estructura algebraica del IBM: soluciones exactas	19
1.3.4. Límite clásico e interpretación geométrica del IBM	24
1.4. Teoría de transiciones de fase	25
1.4.1. Clasificación de Ehrenfest	26
1.4.2. Teoría de Landau	26
1.4.3. Transiciones en sistemas cuánticos	27
2. El punto crítico E(5)	29
2.1. Modelando el punto crítico: potencial de pozo infinito	29
2.2. Otras aproximaciones al punto crítico	38
2.2.1. El punto crítico en el formalismo de estados coherentes	38
2.2.2. El potencial β^4 en el modelo colectivo	39
2.3. Extremos de la transición de fase	42
2.3.1. Límite de núcleo esférico	42
2.3.2. Límite de núcleo deformado γ -inestable	43
3. La cadena isotópica del Ru	45
3.1. Cálculos de energías en el IBM	45
3.2. Búsqueda del punto crítico	50
3.3. Cálculos de transiciones electromagnéticas en el IBM	53
3.4. Comparación de resultados en el punto crítico	53
4. Resumen y conclusiones	61
Bibliografía	62
A. Fundamentos de teoría cuántica de momento angular	65
B. Cálculo de las superficies de energía en el IBM	67

C. Resolución del potencial β^4	71
C.1. Código de MATLAB	74

Capítulo 1

Introducción

En este trabajo, vamos a estudiar núcleos atómicos con un número par de protones y neutrones, desde el punto de vista de dos modelos distintos, el de Bohr-Mottelson (de base geométrica) y el modelo de bosones en interacción (puramente algebraico). Además, veremos una construcción, el formalismo de estados coherentes, que nos permite entender los resultados algebraicos en términos de la geometría descrita en el primer modelo.

Los modelos estudiados nos permiten obtener una relación entre las propiedades dinámicas del núcleo y su forma; veremos, así, como observables como la energía o la probabilidad de transición entre estados caracterizan si la superficie nuclear es esférica o presenta una determinada deformación (elipsoidal, o algo más compleja). Asimismo, estudiaremos cómo pasar de una de estas configuraciones geométricas a otra, desde el punto de vista de la teoría de transiciones de fase. En particular, nos centraremos en el punto crítico entre un núcleo esférico y uno que presente la deformación conocida como “ γ -inestable”.

1.1. El núcleo atómico

El núcleo del átomo es un sistema físico compuesto de nucleones, término que engloba a dos tipos de partículas: los protones y los neutrones. Estas dos partículas presentan bastantes similitudes, ya que ambas tienen masas casi idénticas y son partículas de espín $1/2$ (lo que significa que se someten a la estadística propia de los fermiones). Sin embargo, hay una diferencia esencial entre ellas, y es que los protones tienen carga eléctrica positiva y, los neutrones, nula.

Como sistemas físicos, los nucleones son partículas no fundamentales (tienen componentes más pequeños, los quarks), que interactúan, principalmente, mediante lo que conocemos como fuerza nuclear fuerte. A diferencia de las interacciones más conocidas, como la electromagnética o la gravitatoria, la interacción nuclear fuerte no es analítica ni perturbativa; es decir, no tenemos una expresión exacta para describirla, ni podemos aproximarla mediante desarrollos en serie. Esto lleva a que sea imposible describir de forma exacta la dinámica del núcleo, y debemos recurrir a modelos aproximados.

La forma más natural de aproximarse a un problema de estas características es mediante la formulación de un modelo de campo medio: suponemos que las propiedades dinámicas del núcleo se deben a la interacción de cada nucleón considerado (podemos considerarlos todos, o unos pocos) con un campo que es el promedio de la interacción del resto de nucleones. Ésta es, por ejemplo, la forma que tenemos de tratar el problema de los átomos multielectrónicos: dado que los electrones cuya dinámica queremos calcular interactúan unos con otros, suponemos que podemos expresar toda esa interacción como un

campo electromagnético “global”. La diferencia principal entre un caso y otro es, de nuevo, que no tenemos ningún tipo de certeza de cuál sería la forma de un campo medio nuclear, pues no conocemos la interacción exactamente. Aparte de esto, no podemos obviar la complicación adicional de que, en el caso electrónico, la principal interacción es con un campo externo (el creado por las cargas positivas del núcleo), y las interacciones con el resto de electrones sólo apantallan esta fuerza atractiva, mientras que, en el caso nuclear, no hay fuentes externas que dominen la dinámica del sistema.

Sin embargo, la proposición del campo medio no es necesariamente práctica en todos los casos. Esto no solo es por una posible formulación incorrecta de la interacción ponderada, sino porque hay núcleos cuyas propiedades vienen descritas más fácilmente por otro tipo de dinámicas como, por ejemplo, rotaciones del núcleo en su conjunto o vibraciones de los nucleones superficiales. Por ello, puede ser más adecuado desarrollar un modelo colectivo, en el que perdemos la información microscópica del comportamiento individual de cada nucleón pero ganamos conocimientos globales del sistema nuclear. El primer modelo que presentaremos en este trabajo será uno de estas características. El modelo de Bohr-Mottelson, o modelo colectivo a secas, introducido en [1], parte de una descripción geométrica de la superficie del núcleo y trata su dinámica como una simple combinación de vibraciones y rotaciones.

Si volvemos a los modelos microscópicos, o de descripción “individual” de cada nucleón, nos encontramos con otro hecho que dificulta la resolución de los problemas. Como ya hemos dicho, desde el punto de vista de la estadística cuántica, tanto protones como neutrones son fermiones (tienen espín semi-entero), lo que significa que se ven afectados por el Principio de Exclusión de Pauli. Esto puede suponer una dificultad extra, pues no podemos simplemente calcular el estado de menor energía para los nucleones y situarlos a todos en él. En la estadística de fermiones, los estados tienen una determinada degeneración, con lo que el número máximo de nucleones que pueden situarse en este nivel dependerá de dicha degeneración.

Sin embargo, podemos tratar de solventar este problema a partir de la idea del apareamiento de nucleones. La evidencia experimental nos dice que, para los núcleos, es energéticamente beneficioso que los nucleones tiendan a aparearse (en el sentido de que reducen sus energías si acoplan sus momentos angulares a 0). Si aceptamos esto, podríamos plantearnos una descripción del núcleo, no en base a sus nucleones, sino a parejas de estas partículas. Al acoplar dos espines semi-enteros, obtendremos un espín entero, resultando en parejas de nucleones que se comportan como bosones, pudiendo hacer una descripción más sencilla de ellos. Esta idea es la que dio pie a la formulación del segundo modelo que trataremos, el Modelo de Bosones en Interacción (IBM), presentado en [2], que describe el núcleo a partir de las dinámicas de unos pocos bosones.

Para entender los fundamentos del IBM, debemos también introducir la idea de número mágico, que son unos determinados números de protones o neutrones que hacen que el núcleo sea especialmente estable. La existencia de los números mágicos se puede explicar dentro del modelo de capas, donde tenemos una estructura de niveles energéticos monoparticulares similar a la que encontramos en los átomos multielectrónicos: una serie de capas con amplias separaciones energéticas, cada una poseyendo unos pocos niveles próximos en energías. Los números mágicos aparecen, entonces, cuando hay una cantidad de protones o neutrones tal que todas las capas ocupadas están llenas (hablaremos entonces de capas cerradas). En el IBM, haremos una descripción de la dinámica nuclear obviando todas las capas cerradas que presente el sistema y tratando sólo con los nucleones en los entornos de estas capas cerradas. Por analogía con la estructura electrónica, llamamos a estas partículas “nucleones de valencia” y, en el régimen de bajas energías (unos pocos MeV), será su dinámica la que determine el comportamiento del núcleo.

En el trabajo, veremos que la superficie nuclear puede presentar distintas formas, las cuales pueden depender del número de protones (o número atómico), Z , del número de neutrones, N , o del número total de nucleones (o número másico), A . Dado que estas formas dependen de N y Z , podremos cambiar la superficie nuclear variando estos parámetros. Más adelante veremos que estos cambios constituyen transiciones de fase para el sistema cuántico que es el núcleo, y estudiaremos cómo se relacionan estas transiciones con las que tienen lugar en sistemas clásicos.

1.2. El modelo de Bohr-Mottelson

1.2.1. Descripción geométrica de la superficie nuclear

Para desarrollar el formalismo del modelo colectivo, o modelo de Bohr-Mottelson, partimos de una descripción geométrica de la superficie del núcleo. Si notamos por R la función que describe la superficie nuclear, ésta dependerá de la orientación. Por tanto, la podemos escribir en coordenadas esféricas, $R(\theta, \phi)$ y desarrollarla en serie de los armónicos esféricos:

$$R(\theta, \phi) = R_0 \left(1 + \sum_{\lambda=0}^{+\infty} \sum_{\mu=-\lambda}^{+\lambda} \alpha_{\lambda,\mu} Y_{\lambda,\mu}(\theta, \phi) \right). \quad (1.1)$$

En la ecuación anterior, R_0 representa el radio de la esfera que constituye el núcleo sin perturbar y los coeficientes de Fourier, $\alpha_{\lambda,\mu}$, pueden entenderse como coordenadas en un determinado espacio de deformación. Aparte, dado que R debe ser una función real, y dadas las simetrías de los armónicos esféricos, los coeficientes deben cumplir:

$$\alpha_{\lambda,\mu} = (-1)^\mu \alpha_{\lambda,-\mu}^*. \quad (1.2)$$

Observando los términos del desarrollo, podemos notar que, si nos quedamos a orden 0, sólo estamos imponiendo una variación en el radio del núcleo esférico: $R_0 \rightarrow R_0(1 + \alpha_{0,0}/\sqrt{4\pi})$. Además, podemos despreciar (en primer orden) las aportaciones de los términos dipolares (con $\lambda=1$), ya que estos tienen su origen en un movimiento global del núcleo, con lo que no afectan a la dinámica de la superficie.

Si nos quedamos solamente con los términos de orden 2 de la serie de la ecuación (1.1), tendremos el desarrollo cuadrupolar de la superficie nuclear. En este espacio de deformación, tenemos cinco parámetros, $\alpha_{2,\mu}$ con $\mu = 0, \pm 1, \pm 2$. Podemos plantearnos ahora hacer un cambio del sistema de ejes, pasando del sistema laboratorio al de los ejes propios del sólido que es el núcleo. Este cambio vendrá dado por:

$$a_\nu = \sum_{\mu=-2}^{+2} \alpha_{2,\mu} \mathcal{D}_{\mu,\nu}^2(\theta_i), \quad (1.3)$$

donde $\mathcal{D}_{\mu,\nu}^2$ son los elementos de matriz del operador de rotación para los ángulos de Euler, $\{\theta_1, \theta_2, \theta_3\}$, también conocido como matriz de rotación de Wigner. Estos términos se pueden calcular a partir de los estados de momento angular $|JM\rangle$ como:

$$\mathcal{D}_{M,M'}^J = \langle JM' | \mathcal{R}(\theta_i) | JM \rangle, \quad (1.4)$$

donde hemos usado el convenio de [3].

Si consideramos los coeficientes $\{a_\nu\}$, y dada la simetría que proporciona el sistema de ejes propios, tenemos que $a_1 = a_{-1} = 0$ y $a_2 = a_{-2}$. Por tanto, podemos hacer un cambio de variables en el espacio de deformación cuadrupolar como:

$$\{\alpha_{2,\mu} : \mu = -2 \dots, 2\} \longrightarrow \{a_0, a_2, \theta_1, \theta_2, \theta_3\}. \quad (1.5)$$

En estas circunstancias, y notando por (θ', ϕ') los ángulos esféricos en el sistema propio del núcleo, la parametrización de la superficie es:

$$R(\theta', \phi') = R_0 [1 + a_0 Y_{2,0} + a_2 (Y_{2,2} + Y_{2,-2})]. \quad (1.6)$$

Para darle un significado geométrico más sencillo a estos parámetros, podemos hacer el cambio a las llamadas variables de Hill-Wheeler, $\{\beta, \gamma\}$, definidas a partir de:

$$a_0 = \beta \cos \gamma, \quad a_2 = \frac{\beta}{\sqrt{2}} \sin \gamma. \quad (1.7)$$

Recordamos ahora las formas explícitas de los armónicos esféricos que nos interesan:

$$Y_{2,0}(\theta, \phi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1); \quad Y_{2,\pm 2}(\theta, \phi) = \mp \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \theta e^{\pm 2i\phi}. \quad (1.8)$$

Introduciendo estas expresiones y las variables definidas en la ecuación (1.7) en la forma funcional de la superficie presentada en la ecuación (1.6), tenemos:

$$R(\theta', \phi')/R_0 = 1 + \frac{\beta \cos \gamma}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \theta' - 1) + \frac{\beta \sin \gamma}{4} \sqrt{\frac{15}{\pi}} \sin^2 \theta' \cos(2\phi'). \quad (1.9)$$

Analizando la expresión (1.9), podemos entender el significado geométrico de los parámetros introducidos. Si $\beta = 0$, no hay deformación, y el núcleo recupera la forma esférica, independientemente del valor de γ . Por otro lado, para $\beta \neq 0$ tendremos, en general, un núcleo deformado. El parámetro γ tiene una interpretación menos intuitiva, por lo que veremos lo que sucede al variarlo con ejemplos gráficos. Con el objetivo de visualizar las superficies que podemos considerar, representamos en las Figuras 1.1, 1.2, 1.3 y 1.4 las superficies para algunos valores distintivos de β y γ .

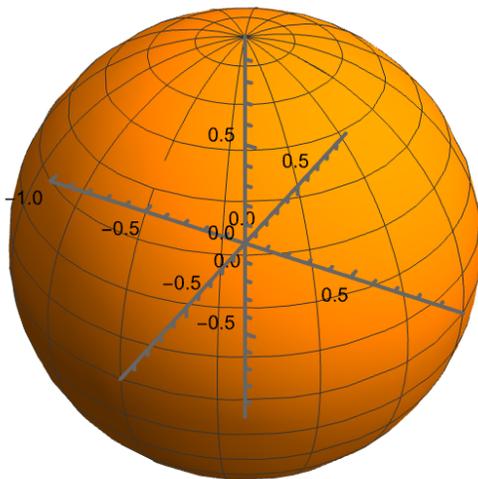


Figura 1.1: Representación de una superficie descrita según la ecuación (1.9) con $\beta = 0$.

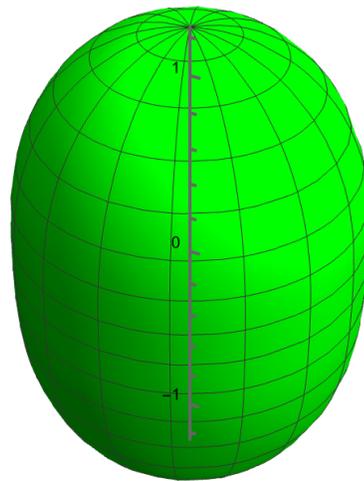


Figura 1.2: Representación de una superficie descrita según la ecuación (1.9) con $\beta = 0,4$ y $\gamma = 0$.

Como podemos apreciar en la Figura 1.1, el núcleo con $\beta = 0$ es esférico, sin importar el valor de γ . En la Figura 1.2, observamos un núcleo que ya presenta una deformación respecto del esférico, pues $\beta > 0$. En este caso, como $\gamma = 0$, vemos un elipsoide de revolución con dos ejes menores y uno mayor; hablamos aquí de que es un núcleo prolado, con simetría respecto del eje z (señalado en la figura).

De forma similar, en la Figura 1.3, observamos un núcleo deformado, ahora con $\gamma = \pi/3$. Notamos que ahora tenemos un elipsoide con dos ejes mayores y un eje menor, siendo éste el eje y ; nos referimos a este tipo de núcleos como oblatos. Por último, en la Figura 1.4, representamos un núcleo deformado con $\gamma = \pi/8$. En este caso, la superficie es triaxial (no presenta ejes principales de simetría).

A partir de estas figuras, podemos vislumbrar más claramente el significado de γ : es un parámetro que varía de 0 a $\pi/3$, de forma que tenemos una superficie prolada en el primer caso y oblada en el segundo. Para valores $\gamma \in (0, \pi/3)$, se obtendrán formas triaxiales transicionales. Si consideramos valores $\gamma > \pi/3$, lo que obtendremos será análogo a lo obtenido, simplemente cambiando cuáles son los ejes principales obtenidos.

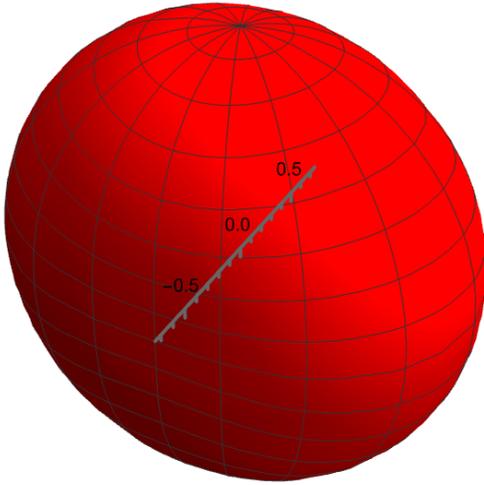


Figura 1.3: Representación de una superficie descrita según la ecuación (1.9) con $\beta = 0,4$ y $\gamma = \pi/3$.

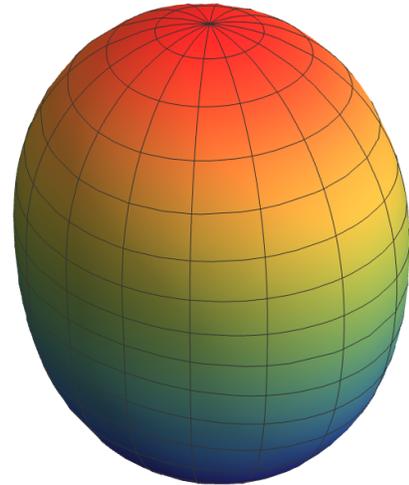


Figura 1.4: Representación de una superficie descrita según la ecuación (1.9) con $\beta = 0,4$ y $\gamma = \pi/8$.

Una vez que hemos expresado la geometría de los núcleos en términos de las variables (β, γ) , nos interesaría buscar la expresión del hamiltoniano y otros observables físicos en ese formalismo.

1.2.2. Ecuación de Schrödinger para las vibraciones y rotaciones superficiales

El hamiltoniano de Bohr es un operador general construido con las coordenadas, α_μ , y sus momentos conjugados, π_μ , del espacio de deformación cuadrupolar. Recordemos que la representación del momento conjugado es:

$$\pi_\mu = \frac{\partial T}{\partial \dot{\alpha}_\mu}. \quad (1.10)$$

Así, el hamiltoniano de Bohr tendrá la forma:

$$H_B = \sum_{\mu=-2}^{+2} \left\{ \frac{1}{2B_2} |\pi_\mu|^2 + \frac{C_2}{2} |\alpha_\mu|^2 \right\}, \quad (1.11)$$

donde B_2 y C_2 son los parámetros de masa y rigidez del sistema, los cuales se pueden obtener a partir del término cuadrupolar del modelo de la gota líquida.

Buscamos, entonces, escribir el hamiltoniano de la ecuación (1.11) en la representación de las variables de Hill-Wheeler. Para ello, separamos el operador en tres términos, como:

$$H_B = T_{vib} + T_{rot} + V, \quad (1.12)$$

donde T_{vib} y T_{rot} son términos cinéticos de vibración y rotación, respectivamente, para la superficie del núcleo y $V = V(\beta, \gamma)$ es el potencial considerado.

El desarrollo de los términos cinéticos, considerando las definiciones de las variables de Hill-Wheeler, lleva a:

$$T_{vib} = -\frac{\hbar^2}{2B_2} \left[\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{\beta^2} \frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} \right], \quad (1.13)$$

$$T_{rot} = \frac{\hbar^2}{2B_2} \frac{1}{4\beta^2} \sum_{k=1}^3 \frac{Q_k^2}{\sin^2(\gamma - \frac{2\pi}{3}k)}.$$

En el término rotacional, T_{rot} , se han usado los operadores Q_k , $k = 1, 2, 3$, que son las componentes del momento angular en el sistema propio del núcleo.

Este planteamiento nos permite buscar funciones de onda $\Psi(\beta, \gamma, \theta_i)$ que sean soluciones de la ecuación de Schrödinger del sistema:

$$H_B(\beta, \gamma, \theta_i) \Psi(\beta, \gamma, \theta_i) = E \Psi(\beta, \gamma, \theta_i). \quad (1.14)$$

Una familia de situaciones de especial interés será la de los casos γ -inestables, en los que el potencial es independiente de las variables γ , de modo que $V = V(\beta)$. Este caso es importante, no solo porque la resolución es más sencilla al poder hacer separación de variables en la ecuación de Schrödinger, sino también porque, como veremos, hay núcleos que quedan bien descritos por potenciales de este tipo.

En efecto, si suponemos $V = V(\beta)$, podemos proponer soluciones de la forma $\Psi(\beta, \gamma, \theta_i) = f(\beta)\Phi(\gamma, \theta_i)$, y separar la ecuación (1.14) en las dos siguientes:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2B} \left(\frac{1}{\beta^4} \frac{\partial}{\partial \beta} \beta^4 \frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{\Lambda}{\beta^2} \right) + V(\beta) \right] f(\beta) = E f(\beta), \quad (1.15)$$

$$\left[-\frac{1}{\sin 3\gamma} \frac{\partial}{\partial \gamma} \sin 3\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma} + \frac{1}{4} \sum_{k=1}^2 \frac{Q_k^2}{\sin^2(\gamma - \frac{2\pi}{3}k)} \right] \Phi(\gamma, \theta_i) = \Lambda \Phi(\gamma, \theta_i). \quad (1.16)$$

Notemos que la ecuación (1.16) no tiene ningún tipo de dependencia del potencial del sistema. Por tanto, podemos entenderla como la ecuación de los armónicos esféricos, que nos da la parte angular de una función de onda cuando tenemos un potencial central tridimensional. La diferencia es que el espacio en el que trabajamos ahora es de cinco dimensiones y los armónicos esféricos asociados están relacionados con generalizaciones a dimensiones superiores del momento angular. De forma análoga, la ecuación (1.15) nos daría la parte radial de la función de onda.

Las soluciones de la ecuación (1.16) están estudiadas y tabuladas, para $L \leq 6$, en [4]. Por conveniencia en la resolución, se escriben como:

$$\Phi_{L,M}^{\tau,\nu}(\gamma, \theta_i) = \sum_{K=-L}^L g_K^{L,\tau,\nu}(\gamma) \mathcal{D}_{M,K}^L(\theta_i). \quad (1.17)$$

Esta descomposición es especialmente útil, pues nos permite describir estas funciones como la composición de una parte en γ y una rotación, proporcionada por las matrices de Wigner. Una propiedad que presentan las funciones en la ecuación anterior es que $g_K = g_{-K}$.

Como podemos ver en la ecuación (1.17), las soluciones de (1.16) vendrán caracterizadas por 4 números cuánticos. L y M representan los autovalores del momento angular y de su proyección sobre el eje z , respectivamente. El valor $\tau = 0, 1, 2, \dots$ se conoce como “seniority” en la literatura, y tiene que ver con el valor de la constante de separación, que es $\Lambda = \tau(\tau + 3)$. Por último, $\nu = 0, 1, \dots, [\tau/3]$ es una etiqueta que proviene de la multiplicidad de la reducción $O(5) \supset O(3)$ y que tomará más sentido cuando tratemos algebraicamente este problema. De momento, basta comentar que no es una etiqueta relevante para estados con momento angular $L \leq 6$.

Con respecto a la ecuación (1.15), podemos simplificarla introduciendo los siguientes parámetros y cambio de variable:

$$\varepsilon = \frac{2B_2}{\hbar^2} E, \quad u(\beta) = \frac{2B_2}{\hbar^2} V(\beta), \quad \varphi(\beta) = \beta^{3/2} f(\beta). \quad (1.18)$$

Usando estos cambios, y el valor calculado de $\Lambda = \tau(\tau + 3)$, obtenemos la siguiente ecuación diferencial para la parte en β de la función de onda:

$$\varphi'' + \frac{1}{\beta} \varphi' + \left[\varepsilon - u(\beta) - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2} \right] \varphi = 0. \quad (1.19)$$

En la Sección 2, propondremos distintos potenciales para la ecuación y trataremos de modelar con ellas una transición de fase en el núcleo.

1.3. El modelo de bosones en interacción (IBM)

1.3.1. Motivación del modelo

Como ya hemos comentado en la introducción, una de las formas de evitar el tener que considerar el principio de exclusión en el núcleo es tratándolo como un sistema fermiones acoplados, resultando en un conjunto de bosones. Esta suposición no viene solo por conveniencia, sino que la evidencia experimental indica que los nucleones tienden al apareamiento.

En este modelo, cuyas bases están recopiladas en [2], hacemos las siguientes consideraciones básicas:

1. Sólo los nucleones en capas abiertas contribuyen a la dinámica nuclear. Por tanto, despreciamos las contribuciones de todas las partículas que estén en capas completas.
2. Suponemos que los pares de nucleones se acoplan a un bosón de paridad positiva. Si consideramos acoplamiento protón-protón o neutrón-neutrón, al ser partículas idénticas, tendremos un espín total $S = 0$, a lo que hay que sumar el momento angular orbital. Dada la paridad positiva, los momentos angulares orbitales menos energéticos serán $L = 0, 2$. Por tanto, tendremos los momentos angulares totales $J^\pi = 0^+, 2^+$.
3. Dado que, en este formalismo, sólo vamos a considerar bosones formados por pares de nucleones, es necesario que el núcleo tenga un número másico A par. En la construcción que haremos, no habrá ningún tipo de distinción entre bosones provenientes del acoplamiento de dos neutrones, dos protones, o un protón y un neutrón. Sin embargo, los resultados no se ajustan bien a núcleos con N y Z impares. En este último caso tendríamos, necesariamente, bosones que provienen de

un acoplamiento protón-neutrón, lo que nos obligaría a considerar también el caso $J^\pi = 1^+$, al no tener la restricción $S = 0$ en ese acoplamiento. Por tanto, sólo consideraremos núcleos con N y Z pares (o “núcleos par-par”).

Como ya hemos comentado, es posible hacer generalizaciones del formalismo que presentaremos del IBM para núcleos impar-impar. Además, también existen modelos híbridos, donde consideramos fermiones sin acoplar, que nos permiten estudiar núcleos impar-par. Estos modelos presentan una elevada complejidad teórica y no proporcionan grandes mejoras en los resultados para los núcleos par-par, con lo que los obviaremos en este trabajo.

1.3.2. Formalismo del IBM: operadores y observables

Como hemos dicho al principio de esta sección, en el IBM consideramos que el núcleo (en el entorno de las capas llenas) está compuesto por bosones de momento angular $J^\pi = 0^+$ ó $J^\pi = 2^+$. Para formular una teoría con este tipo de partículas, usamos el formalismo de segunda cuantización, o cuantización canónica. Para ello, definimos operadores de creación y aniquilación para cada uno de los tipos de bosones considerados:

$$\begin{aligned} \text{Bosones de momento angular } J^\pi = 0^+ &\longleftrightarrow s^\dagger, s; \\ \text{Bosones de momento angular } J^\pi = 2^+ &\longleftrightarrow d_\mu^\dagger, d_\mu, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \end{aligned}$$

donde hemos considerado operadores asociados a cada una de las posibles proyecciones de espín ($\mu = 0, \pm 1, \pm 2$) en el caso de los bosones de “tipo d ”.

De cara a hacer una formulación más compacta, notaremos estos operadores también como:

$$b_\alpha, b_\alpha^\dagger, \quad \alpha = 1, \dots, 6, \quad \text{con} \quad \begin{cases} b_1 = s, b_2 = d_{+2}, b_3 = d_{+1}, \\ b_4 = d_0, b_5 = d_{-1}, b_6 = d_{-2}, \end{cases} \quad (1.20)$$

o como:

$$b_{l,m}, b_{l,m}^\dagger, \quad l = 0, 2, \quad -l \leq m \leq l. \quad (1.21)$$

Por ser los operadores definidos en las ecuaciones anteriores operadores bosónicos, cumplirán las relaciones de conmutación de Bose, formuladas como:

$$[b_\alpha, b_{\alpha'}^\dagger] = \delta_{\alpha\alpha'}, \quad [b_\alpha, b_{\alpha'}] = [b_\alpha^\dagger, b_{\alpha'}^\dagger] = 0. \quad (1.22)$$

A la hora de formular la teoría del IBM, deseamos que los operadores derivados de los de creación y aniquilación, como el hamiltoniano, sean escalares. Para ello, debemos asegurar que los operadores de los que partimos son tensores esféricos de un cierto orden k , es decir, que se transforman como vectores básicos del grupo de rotaciones de $(2k + 1)$ dimensiones.

Aquí, nos encontramos con el problema de que los operadores de aniquilación no cumplen esta propiedad, con lo que hay que introducir los operadores:

$$\tilde{b}_{l,m} := (-)^{l+m} b_{l,-m} \quad \Rightarrow \quad \tilde{s} = s, \quad \tilde{d}_\mu = (-)^\mu d_{-\mu}. \quad (1.23)$$

Una vez que hemos introducido operadores tensoriales, podemos definir operaciones asociadas a estos. Como se ve en [5], dado que un tensor esférico $T^{(j)}$, de componentes $T_\mu^{(j)}$, se transforma bajo rotaciones como los autoestados del momento angular, $|j \mu\rangle$, estas operaciones son análogas al acoplamiento de

los momentos angulares de los tensores considerados.

Primero, dados los operadores $U^{(k_1)}$ y $V^{(k_2)}$, con respectivas componentes $U_{m_1}^{(k_1)}$ y $V_{m_2}^{(k_2)}$, introducimos su producto tensorial, $T^{(k)}$, definido como:

$$T_{\mu}^{(k)} \equiv [U^{(k_1)} \times V^{(k_2)}]_{\mu}^{(k)} := \sum_{m_1, m_2} \langle k_1 m_1 k_2 m_2 | k \mu \rangle U_{m_1}^{(k_1)} V_{m_2}^{(k_2)}. \quad (1.24)$$

En la expresión anterior, el símbolo $\langle k_1 m_1 k_2 m_2 | k \mu \rangle$ es un coeficiente de Clebsch-Gordan. La inclusión de este coeficiente nos permite ver más claramente el “acoplamiento” que hacemos de los tensores.

La definición del producto tensorial es especialmente útil en el IBM, pues nos permite construir estados con momento angular bien definido, actuando con un producto tensorial de operadores de creación sobre el estado vacío:

$$|L M\rangle = [b_{l'}^{\dagger} \times b_{l''}^{\dagger} \times \dots]_M^{(L)} |0\rangle. \quad (1.25)$$

Un caso particular del producto tensorial definido en la ecuación (1.24) es el producto escalar, que viene del acoplamiento a momento angular 0 de dos tensores esféricos del mismo orden:

$$(U^{(k)} \cdot V^{(k)}) := (-)^k \sqrt{2k+1} [U^{(k)} \times V^{(k)}]_0^{(0)}. \quad (1.26)$$

Desarrollando esta expresión, tenemos:

$$(U^{(k)} \cdot V^{(k)}) := (-)^k \sqrt{2k+1} [U^{(k)} \times V^{(k)}]_0^{(0)} = (-)^k \sqrt{2k+1} \sum_{m_1, m_2} \langle k m_1 k m_2 | 0 0 \rangle U_{m_1}^{(k)} V_{m_2}^{(k)}, \quad (1.27)$$

que podemos simplificar usando la propiedad:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | 0 0 \rangle = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1, -m_2} \frac{(-)^{j_1 - m_1}}{\sqrt{2j_1 + 1}}, \quad (1.28)$$

de modo que:

$$\sum_{m_1, m_2} \langle k m_1 k m_2 | 0 0 \rangle U_{m_1}^{(k)} V_{m_2}^{(k)} = \sum_m \frac{(-)^{k-m}}{\sqrt{2k+1}} U_m^{(k)} V_{-m}^{(k)}, \quad (1.29)$$

y el producto escalar es:

$$(U^{(k)} \cdot V^{(k)}) = \sum_m (-)^m U_m^{(k)} V_{-m}^{(k)}. \quad (1.30)$$

Con estas operaciones definidas, estamos en condiciones de presentar las distintas formas que puede tomar el hamiltoniano del IBM. En las siguientes formulaciones, asumiremos que no consideramos interacciones a más de dos cuerpos.

Recordemos también que una de las hipótesis que introducimos en este formalismo es que el número de bosones del sistema permanece constante, lo que se traduce en que construiremos observables a partir de combinaciones de la forma $b_{\alpha}^{\dagger} b_{\alpha}$ para contribuciones a un cuerpo, y $b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} b_{\gamma} b_{\omega}$ a dos cuerpos.

Así, la forma más elemental del operador será:

$$H = E_0 + \sum_{\alpha, \beta} \varepsilon_{\alpha, \beta} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \omega} \frac{1}{2} u_{\alpha, \beta, \gamma, \omega} b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}^{\dagger} b_{\gamma} b_{\omega}. \quad (1.31)$$

Pese a que la forma del hamiltoniano expuesta en la ecuación (1.31) es sencilla, ésta presenta el problema de que no es explícitamente escalar: a simple vista, no podríamos afirmar que sea invariante bajo rotaciones. Para presentar una formulación directamente escalar, lo expresamos en términos de productos escalares y tensoriales de orden 0, que, de forma general, tiene la siguiente forma:

$$H = E_0 + \sum_l \varepsilon (b_l^\dagger \cdot \tilde{b}_l) + \sum_L \sum_{l,l',j,j'} \frac{1}{2} u_{l,l',j,j'}^{(L)} [[b_l^\dagger \times b_{l'}^\dagger]^{(L)} \times [[\tilde{b}_j \times \tilde{b}_{j'}]^{(L)}]_0^{(0)}. \quad (1.32)$$

Finalmente, presentamos la forma más común del hamiltoniano, y la que usaremos para realizar los cálculos en la Sección 3. Este desarrollo es el de expansión multipolar, en la variación Q -consistente:

$$H = E'_0(N) + \varepsilon_d \hat{n}_d + \kappa_0 (\hat{\mathcal{P}}^\dagger \cdot \hat{\mathcal{P}}) + \kappa_1 (\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}}) + \kappa_2 (\hat{\mathcal{Q}}^x \cdot \hat{\mathcal{Q}}^x) + \kappa_3 (\hat{\mathcal{T}}_3 \cdot \hat{\mathcal{T}}_3) + \kappa_4 (\hat{\mathcal{T}}_4 \cdot \hat{\mathcal{T}}_4), \quad (1.33)$$

donde hemos usado los operadores:

$$\begin{aligned} \hat{n}_d &= (d^\dagger \cdot \tilde{d}), \\ \hat{\mathcal{P}}^\dagger &= \{(d^\dagger \cdot d^\dagger) + (s^\dagger \cdot s^\dagger)\} / 2, \\ \hat{\mathcal{L}} &= \sqrt{10} [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(1)}, \\ \hat{\mathcal{Q}}^x &= [d^\dagger \times \tilde{s} + s^\dagger \times \tilde{d}]^{(2)} + \chi [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(2)}, \\ \hat{\mathcal{T}}_3 &= [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(3)}, \\ \hat{\mathcal{T}}_4 &= [d^\dagger \times \tilde{d}]^{(4)}. \end{aligned} \quad (1.34)$$

La formulación expuesta en la ecuación (1.33) presenta dos ventajas esenciales sobre los hamiltonianos de las ecuaciones (1.31) y (1.32). Primero, es directo ver cuántos parámetros libres tiene el operador. Pese a que el número de grados de libertad que tenemos en el hamiltoniano es invariante, independientemente de la formulación que escojamos, las dos primeras no dejan explícito ni esta invariancia ni el propio número. En la expresión (1.33), vemos directamente que tenemos 9 parámetros a fijar (notemos que E'_0 dependerá del origen de energía, E_0 , y del número de bosones, N).

El otro punto a favor que presenta la expresión de la ecuación (1.33) es la interpretación de los términos. En el caso de las primeras propuestas, el hamiltoniano se presenta simplemente como combinación lineal de productos de operadores de aniquilación y creación. Sin embargo, los operadores definidos en la ecuación (1.34) tienen una interpretación más directa. Por ejemplo, el término \hat{n}_d representa el “exceso” de energía debido a tener bosones acoplados a momento angular 2 en vez de 0; los términos $\hat{\mathcal{T}}_{3,4}$ se refieren a la aportación energética de pares de bosones que se puedan acoplar a momentos 3 ó 4, respectivamente, etcétera.

Aparte del hamiltoniano H , relacionado con el observable que es la energía, otra familia de operadores de especial relevancia en el estudio de la estructura nuclear son los operadores de transición electromagnética de multipolaridad λ , en los cuales distinguimos los de transiciones eléctricas, $T^{(E\lambda)}$, y magnéticas, $T^{(M\lambda)}$. Estos operadores están relacionados con la probabilidad de transición por unidad de tiempo, o ratio de transición, un observable que también es de especial relevancia experimental.

En el caso general de un operador de transición de multipolaridad λ , lo podremos expresar en primer orden como:

$$T^{(\lambda)} = t_0^{(0)} \delta_{\lambda 0} + \sum_{\alpha, \beta} t_{\alpha, \beta}^{(\lambda)} b_\alpha^\dagger b_\beta. \quad (1.35)$$

En el caso de estos operadores, buscamos que se transformen como tensores esféricos de rango λ bajo rotaciones, con lo que, siguiendo la idea usada en la ecuación (1.32) para definir el hamiltoniano escalar, conviene escribir $T^{(\lambda)}$ como combinación de productos tensoriales, esta vez de rango λ :

$$T_{\mu}^{(\lambda)} = t_0^{(0)} \delta_{\lambda 0} + \sum_{l,l'} t_{l,l'}^{(\lambda)} [b_l^{\dagger} \times \tilde{b}_{l'}]_{\mu}^{(\lambda)}. \quad (1.36)$$

La interpretación de estos términos es más sencilla que en el caso de la ecuación (1.35). El término de orden 0 actúa como una constante aditiva en el caso de que consideremos transiciones triviales $E0$ y los términos de orden λ sirven para “conectar” el estado considerado con el final mediante un tensor de orden λ .

Siguiendo la interpretación de que el orden de un tensor esférico se asocia con un momento angular del tensor, esto nos facilita ver que una de las reglas de selección de estos operadores será:

$$\langle f | T^{(\lambda)} | i \rangle = 0 \quad \text{si no se cumple} \quad |L_i - L_f| \leq \lambda \leq L_i + L_f. \quad (1.37)$$

Como ya hemos comentado, la representación más usada a la hora de realizar cálculos es la expansión multipolar o Q -consistente. En esta, los primeros operadores de transición toman la forma:

$$\begin{aligned} T^{(E0)} &= \gamma_0 + \beta_0 \hat{n}_d, \\ T^{(M1)} &= g \hat{\mathcal{L}}, \\ T^{(E2)} &= q \hat{\mathcal{Q}}^x, \\ T^{(M3)} &= \beta_3 \hat{\mathcal{T}}_3, \\ T^{(E4)} &= \beta_4 \hat{\mathcal{T}}_4. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Notemos que, en la ecuación anterior, sólo hemos considerado transiciones $E\lambda$, con λ par, o $M\lambda'$, con λ' impar. La razón de esto es sencilla: en las transiciones electromagnéticas entre estados nucleares, aparecen las siguientes reglas de selección sobre la paridad:

$$\begin{aligned} \langle f | T^{(E\lambda)} | i \rangle &= 0 \quad \text{si} \quad \pi_i \pi_f \neq (-)^{\lambda}, \\ \langle f | T^{(M\lambda)} | i \rangle &= 0 \quad \text{si} \quad \pi_i \pi_f \neq (-)^{(\lambda+1)}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Dado que en el IBM sólo vamos a obtener estados con paridad positiva (todos los bosones tienen $J^{\pi} = 0^+, 2^+$), cualquier par de estados considerado en el IBM cumple $\pi_i \pi_f = +1$, con lo que, según las reglas de selección de la ecuación (1.39), sólo se conectarán mediante transiciones eléctricas de multipolaridad par, o magnéticas de multipolaridad impar.

1.3.3. Estructura algebraica del IBM: soluciones exactas

A lo largo de la sección anterior, hemos definido los fundamentos del IBM. Habiendo obtenido una expresión del hamiltoniano, podríamos optar por buscar métodos numéricos para resolver su problema de autovalores. Sin embargo, merece la pena estudiar la existencia de soluciones exactas al problema, para obtener bases en las que diagonalizar los operadores y facilitar la resolución general.

Dada la naturaleza del modelo, la existencia de estas soluciones exactas vendrá del estudio de propiedades algebraicas de sus operadores. En esta sección, estudiaremos estas propiedades y las soluciones que nos proporcionan.

Para empezar, definimos un álgebra de Lie como un conjunto $X = \{X_\alpha\}_{\alpha \in A}$, con una operación $[\cdot, \cdot]$, cuyos elementos satisfacen la relación:

$$[X_\alpha, X_\beta] = \sum_{\gamma} C_{\alpha\beta}^{\gamma} X_{\gamma}, \quad C_{\alpha\beta}^{\gamma} = -C_{\beta\alpha}^{\gamma}, \quad (1.40)$$

aparte de la identidad de Jacobi:

$$[[X_\alpha, X_\beta], X_\gamma] + [[X_\beta, X_\gamma], X_\alpha] + [[X_\gamma, X_\alpha], X_\beta] = 0. \quad (1.41)$$

Consideremos ahora la familia de productos bilineales de operadores de creación y aniquilación:

$$\Xi = \{G_{\alpha\beta} = b_\alpha^\dagger b_\beta, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, 6\}. \quad (1.42)$$

Estos operadores satisfacen la relación de conmutación:

$$\begin{aligned} [G_{\alpha\beta}, G_{\gamma\omega}] &= [b_\alpha^\dagger b_\beta, b_\gamma^\dagger b_\omega] = [b_\alpha^\dagger b_\beta, b_\gamma^\dagger] b_\omega + b_\gamma^\dagger [b_\alpha^\dagger b_\beta, b_\omega] = -[b_\gamma^\dagger, b_\alpha^\dagger b_\beta] b_\omega - b_\gamma^\dagger [b_\omega, b_\alpha^\dagger b_\beta] = \\ &= -\{[b_\gamma^\dagger, b_\alpha^\dagger] b_\beta + b_\alpha^\dagger [b_\gamma^\dagger, b_\beta]\} b_\omega - b_\gamma^\dagger \{[b_\omega, b_\alpha^\dagger] b_\beta + b_\alpha^\dagger [b_\omega, b_\beta]\} = \\ &= b_\alpha^\dagger b_\omega \delta_{\beta\gamma} - b_\gamma^\dagger b_\beta \delta_{\alpha\omega} = G_{\alpha\omega} \delta_{\beta\gamma} - G_{\gamma\beta} \delta_{\alpha\omega}, \end{aligned} \quad (1.43)$$

con lo que cumplen la relación (1.40); además, debido a las propiedades elementales de los conmutadores, también satisfacen la identidad de Jacobi. Por tanto, Ξ forma un álgebra de Lie.

Dado que Ξ tiene 36 elementos, lo identificamos con el álgebra unitaria de 6 dimensiones, $u(6)$. Asociado a este álgebra, tenemos su grupo de transformaciones, $U(6)$. Por abuso de lenguaje, nos referiremos indistintamente al álgebra de Lie de los operadores y a su grupo de transformaciones.

Para las aplicaciones de la teoría de álgebras que desarrollaremos posteriormente, es más adecuado considerar, en vez de la familia de productos bilineales, la de productos tensoriales:

$$\Omega = \{G_\mu^{(j)}(l, l') = [b_l^\dagger \times \tilde{b}_{l'}]^{(j)}, \quad l, l' = 0, 2\}. \quad (1.44)$$

Se puede comprobar que estos operadores satisfacen las relaciones de conmutación:

$$\begin{aligned} [G_\mu^{(j)}(l, l'), G_m^{(J)}(L, L')] &= \sum_{K, \kappa} (-)^{j-J} \sqrt{(2j+1)(2J+1)} \langle j \mu J m | K \kappa \rangle \times \\ &\times \left[(-)^{j+J+K} \begin{Bmatrix} j & J & K \\ L' & l & l' \end{Bmatrix} \delta_{L, l'} G_\kappa^{(K)}(l, L') - \right. \\ &\left. - \begin{Bmatrix} j & J & K \\ L & l' & l \end{Bmatrix} \delta_{l, L'} G_\kappa^{(K)}(l', L) \right], \end{aligned} \quad (1.45)$$

donde hemos introducido los símbolos $6j$ de Wigner, definidos en el Apéndice A. Como podemos observar, en la ecuación (1.45) hemos recuperado la estructura de conmutación buscada para las álgebras de Lie.

Haciendo la identificación $l = 0 \leftrightarrow s$, $l = 2 \leftrightarrow d$, podemos escribir las formas explícitas de estos

tensores como:

$$\begin{aligned}
 G_0^{(0)}(s, s) &= [s^\dagger \times \tilde{s}]_0^{(0)}, \\
 G_0^{(0)}(d, d) &= [d^\dagger \times \tilde{d}]_0^{(0)}, \\
 G_\mu^{(1)}(d, d) &= [d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(1)}, \quad \mu = 0, \pm 1 \\
 G_\mu^{(2)}(d, d) &= [d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(2)}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \\
 G_\mu^{(2)}(s, d) &= [s^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(2)}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \\
 G_\mu^{(2)}(d, s) &= [d^\dagger \times \tilde{s}]_\mu^{(2)}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2 \\
 G_\mu^{(3)}(d, d) &= [d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(3)}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \\
 G_\mu^{(4)}(d, d) &= [d^\dagger \times \tilde{d}]_\mu^{(4)}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \pm 4,
 \end{aligned} \tag{1.46}$$

con lo que vemos claramente que seguimos manteniendo 36 elementos. Por tanto, Ω también puede ser identificada con $U(6)$.

Habiendo identificado el álgebra de los operadores del IBM, ahora vamos a buscar subálgebras; la idea es que, construyendo una cadena de subálgebras, podemos obtener bases a partir de estados que “caractericen” cada elemento de la cadena. Dado que los estados nucleares deben tener un momento angular bien definido, la cadena usada debe incluir al álgebra de rotaciones tridimensionales, $O(3)$ (y, por completitud, $O(2)$, que sería el álgebra de las rotaciones alrededor del eje z y nos daría el número cuántico de la proyección del momento angular).

Entonces, estamos buscando cadenas de la forma:

$$U(6) \supset \mathfrak{a}_1 \supset \mathfrak{a}_2 \supset \cdots \supset \mathfrak{a}_n \supset O(3) \supset O(2). \tag{1.47}$$

Para realizar esta búsqueda, usaremos la forma de los operadores $G_\mu^{(j)}(l, l')$, que es especialmente útil porque los operadores $G_\mu^{(1)}(d, d)$, $\mu = 0, \pm 1$, son los generadores de $O(3)$. Podemos conectar este hecho con unas de las definiciones del desarrollo multipolar que presentamos en la ecuación (1.34): el escalar $\hat{L} \cdot \hat{L}$ es proporcional a $G^{(1)}(d, d) \cdot G^{(1)}(d, d)$, que podemos, entonces, asociar con el operador L^2 usado típicamente en Mecánica Cuántica.

La imposición de terminar la cadena con $O(3) \supset O(2)$ simplifica el problema, pues hay una cantidad finita de subálgebras admisibles, clasificadas en [6]. Más concretamente, nos encontramos sólo con 3 cadenas compatibles. A continuación, describimos brevemente cómo se obtienen estas cadenas y los estados básicos que nos proporcionan:

1. La primera cadena se obtiene al considerar los operadores:

$$\Omega_1 = \{G_\mu^{(j)}(d, d), \quad j = 0, 1, \dots, 4, \mu = -j, \dots, j\}. \tag{1.48}$$

Estos 25 operadores forman el álgebra $U(5)$, que es un subálgebra de $U(6)$. A continuación, consideramos

$$\Omega_2 = \{G_\mu^{(j)}(d, d), \quad j = 1, 3, \mu = -j, \dots, j\}, \tag{1.49}$$

que es un conjunto de 10 operadores que forman el álgebra $O(5) \subset U(5)$. A partir de esta, tenemos directamente $O(3)$ sólo con tomar los operadores $\{G_\mu^{(1)}(d, d), \quad \mu = 0, \pm 1\}$. Por tanto, hemos formado la cadena:

$$U(6) \supset U(5) \supset O(5) \supset O(3) \supset O(2). \tag{1.50}$$

Esta cadena nos proporciona estados básicos caracterizados por 6 números cuánticos; necesitamos uno más que álgebras, porque la reducción $O(5) \supset O(3)$ no es única. Tenemos entonces:

$$\left| \begin{array}{ccccc} U(6) & \supset & U(5) & \supset & O(5) & \supset & O(3) & \supset & O(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ N & & n_d & & \nu, \tilde{n}_\Delta & & L & & M_L \end{array} \right\rangle \Rightarrow |N n_d \nu \tilde{n}_\Delta L M_L\rangle. \quad (1.51)$$

2. La segunda cadena se obtiene a partir de:

$$\Omega_1 = \left\{ G_0^{(0)}(s, s) + \sqrt{5}G_0^{(0)}(d, d), G_\mu^{(1)}(d, d), G_\mu^{(2)}(d, s) + G_\mu^{(2)}(s, d) - \frac{\sqrt{7}}{2}G_\mu^{(2)}(d, d) \right\}, \quad (1.52)$$

que es un álgebra de 9 operadores que identificamos con $U(3)$; después de esta, consideramos:

$$\Omega_2 = \left\{ G_\mu^{(1)}(d, d), G_\mu^{(2)}(d, s) + G_\mu^{(2)}(s, d) - \frac{\sqrt{7}}{2}G_\mu^{(2)}(d, d) \right\}, \quad (1.53)$$

que asociamos con $SU(3)$, a partir de la cual la reducción a $O(3)$ es directa. El resultado final es:

$$U(6) \supset SU(3) \supset O(3) \supset O(2). \quad (1.54)$$

Al igual que pasaba en la primera cadena, la reducción $SU(3) \supset O(3)$ no es única, lo que nos da dos números cuánticos “extra” asociados a $SU(3)$:

$$\left| \begin{array}{ccccc} U(6) & \supset & SU(3) & \supset & O(3) & \supset & O(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ N & & (\lambda, \mu), \tilde{\xi} & & L & & M_L \end{array} \right\rangle \Rightarrow |N \lambda \mu \tilde{\xi} L M_L\rangle. \quad (1.55)$$

3. Por último, la tercera cadena parte de:

$$\Omega_1 = \{G_\mu^{(1)}(d, d), G_\mu^{(3)}(d, d), G_\mu^{(2)}(d, s) + G_\mu^{(2)}(s, d)\}, \quad (1.56)$$

que es un conjunto de operadores que cierra bajo el álgebra $O(6)$. Tras ella, consideramos un Ω_2 idéntico al planteado en la ecuación (1.49), con lo que recuperamos el resto de la primera cadena. Por tanto, esta última posibilidad es:

$$U(6) \supset O(6) \supset O(5) \supset O(3) \supset O(2), \quad (1.57)$$

y tenemos estados básicos:

$$\left| \begin{array}{ccccc} U(6) & \supset & O(6) & \supset & O(5) & \supset & O(3) & \supset & O(2) \\ \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\ N & & \sigma & & \tau, \tilde{\nu}_\Delta & & L & & M_L \end{array} \right\rangle \Rightarrow |N \sigma \tau \tilde{\nu}_\Delta L M_L\rangle. \quad (1.58)$$

Una vez hemos presentado las distintas bases algebraicas que podemos obtener para diagonalizar el hamiltoniano del IBM, debemos preguntarnos cuál es el proceso para hacer esta resolución. En general, podemos hacer esta diagonalización numéricamente, como haremos en el Capítulo 3. Sin embargo, ahora vamos a introducir unas situaciones de especial interés, conocidas como simetrías dinámicas.

Las simetrías dinámicas aparecen cuando el hamiltoniano es combinación lineal de operadores que son diagonales en una determinada base. En el contexto de bases obtenidas a partir de una cadena de subgrupos, $G \supset G' \supset \dots$, como hemos hecho en las últimas páginas, estos operadores reciben el nombre de operadores de Casimir $\mathcal{C}(G)$. Dado que estos operadores ya son diagonales, tendremos:

$$H = \alpha\mathcal{C}(G) + \alpha'\mathcal{C}(G') + \dots \Rightarrow E = \alpha\langle\mathcal{C}(G)\rangle + \alpha'\langle\mathcal{C}(G')\rangle + \dots \quad (1.59)$$

Formalmente, dada un álgebra $\Omega = \{X_\alpha\}_{\alpha \in A}$, un operador de Casimir \mathcal{C} será aquel que cumpla:

$$[\mathcal{C}, X_\alpha] = 0, \quad \forall \alpha \in A. \quad (1.60)$$

Por ejemplo, el grupo de las rotaciones en el espacio tridimensional está generado por las componentes del momento angular, $\{L_i\}$. Además, sabemos que:

$$[L^2, L_i] = 0, \quad \forall i = x, y, z \Rightarrow [L^2, X] = 0, \quad \forall X \in O(3), \quad (1.61)$$

Con lo que tendríamos que L^2 es un operador de Casimir para el álgebra $O(3)$. En términos de nuestros operadores, los generadores de $O(3)$ son $\{G_\mu^{(1)}(d, d)\}$; por tanto, tenemos:

$$[G^{(1)}(d, d) \cdot G^{(1)}(d, d), X] = 0, \quad \forall X \in O(3), \quad (1.62)$$

Y, así, $G^{(1)}(d, d) \cdot G^{(1)}(d, d)$ es un operador de Casimir para este grupo. Podemos notar que un operador no pierde la propiedad de conmutar con todo el grupo al multiplicarlo por una constante, luego el producto escalar $\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}}$, definido en (1.34), también es de Casimir.

Los operadores de Casimir de cada grupo que hemos considerado en el IBM están estudiados y tabulados. Podemos expresar los más relevantes en función de los operadores definidos en la ecuación (1.34) como:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1[U(6)] &= \hat{N} = (d^\dagger \cdot \tilde{d}) + (s^\dagger \cdot \tilde{s}), \\ \mathcal{C}_1[U(5)] &= \hat{n}_d, \\ \mathcal{C}_2[SU(3)] &= [2\hat{Q}^0 \cdot \hat{Q}^0 + 3(\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}})/4] \cdot 2/3, \\ \mathcal{C}_2[O(6)] &= 2[\hat{N}(\hat{N} + 4) - 4\hat{\mathcal{P}}^\dagger \cdot \hat{\mathcal{P}}], \\ \mathcal{C}_2[O(5)] &= 4[(\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}})/10 + \hat{\mathcal{T}}_3 \cdot \hat{\mathcal{T}}_3], \\ \mathcal{C}_2[O(3)] &= 2(\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}}). \end{aligned} \quad (1.63)$$

En la ecuación (1.63), aparecen operadores notados como \mathcal{C}_i , $i = 1, 2$; este índice se refiere a si el invariante considerado es lineal o cuadrático.

En términos de estos operadores, el hamiltoniano más general será:

$$\begin{aligned} H &= e_0 + e_1\mathcal{C}_1[U(6)] + e_2\mathcal{C}_2[U(6)] + \varepsilon\mathcal{C}_1[U(5)] + \alpha\mathcal{C}_2[U(5)] + \beta\mathcal{C}_2[O(5)] + \\ &+ \gamma\mathcal{C}_2[O(3)] + \delta\mathcal{C}_2[SU(3)] + \eta\mathcal{C}_2[O(6)]. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Notemos que el hamiltoniano definido en la ecuación (1.64) preserva 9 parámetros a fijar. Además, hay que comentar que no se ha incluido un operador de Casimir de $O(2)$ en el hamiltoniano pues, al igual que en otras situaciones que aparecen típicamente en Mecánica Cuántica, no esperamos que la energía del sistema dependa de una proyección arbitraria del momento angular (suponiendo que hay isotropía espacial y no existe ningún factor que dé preferencia a ciertas direcciones, como pueden ser

los campos magnéticos externos).

Habiendo expresado H en términos de operadores de Casimir, podemos plantearnos el caso de tener un hamiltoniano descrito con operadores de Casimir de dos de las cadenas. Por ejemplo, un caso especialmente relevante para este trabajo será una “mezcla” de las cadenas de $U(5)$ y de $O(6)$, como:

$$H = \varepsilon \mathcal{C}_1[U(5)] + \alpha \mathcal{C}_2[U(5)] + \beta \mathcal{C}_2[O(5)] + \gamma \mathcal{C}_2[O(3)] + \eta \mathcal{C}_2[O(6)], \quad (1.65)$$

donde hemos obviado los términos e_0 y $\mathcal{C}_i[U(6)]$, que son constantes aditivas. El hamiltoniano presentado en la ecuación (1.65) sirve para modelar un núcleo que se encuentra en una situación intermedia entre los límites algebraicos de ambas bases.

Estas situaciones son conocidas como clases transicionales, y adquirirán más importancia en la Sección 3, en la que analizamos la cadena de isótopos del rutenio, que se mueve entre el límite $O(6)$ y el límite $U(5)$.

1.3.4. Límite clásico e interpretación geométrica del IBM

A lo largo de las secciones anteriores, hemos formulado el IBM como un modelo puramente algebraico. Sin embargo, en la Sección 1.2 hemos introducido también el formalismo de Bohr-Mottelson, con un enfoque semiclásico que nos da información de la geometría del núcleo. Si queremos conectar los posibles resultados obtenidos en ambos modelos, debemos introducir una forma de darle un significado geométrico a las estructuras algebraicas del IBM. En esta sección, plantharemos el formalismo de estados coherentes, propuesto originalmente en [7], una teoría de campo medio que nos permite asociar el álgebra del IBM con una geometría del núcleo.

La base de este formalismo es considerar estados de condensados bosónicos de la forma:

$$|N; \beta, \gamma\rangle = \frac{1}{N!} (\Gamma_g^\dagger)^N |0\rangle, \quad (1.66)$$

donde $|0\rangle$ representa el estado vacío, (β, γ) son parámetros variacionales y Γ_g^\dagger es el operador de creación de bosones coherentes, definido como:

$$\Gamma_g^\dagger = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2}} \left[s^\dagger + \beta \cos \gamma d_0^\dagger + \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma (d_2^\dagger + d_{-2}^\dagger) \right]. \quad (1.67)$$

Dados estos estados, obtendremos unas superficies de energía $E = E(N; \beta, \gamma)$ a partir de la evaluación del valor esperado del hamiltoniano, H :

$$E(N; \beta, \gamma) = \langle N; \beta, \gamma | H | N; \beta, \gamma \rangle. \quad (1.68)$$

Tomando el hamiltoniano multipolar, definido en la ecuación (1.33), este valor esperado más general será (los detalles del cálculo se incluyen en el Anexo B):

$$\begin{aligned} E(N; \beta, \gamma) = & \frac{N\beta^2}{1+\beta^2} \left(\varepsilon_d + 6\kappa_1 + \frac{7}{5}\kappa_3 + \frac{9}{5}\kappa_4 \right) + \\ & + \frac{N(N-1)}{(1+\beta^2)^2} \left[\frac{\kappa_0}{4}(1-\beta^2)^2 - \frac{4\sqrt{14}}{7}\kappa_2\chi\beta^3 \cos(3\gamma) + \frac{18}{35}\kappa_4\beta^4 \right] + \\ & + \frac{N\kappa_2}{(1+\beta^2)^2} \left[5 + (\chi^2 + 4N + 2)\beta^2 + \left(1 + \frac{\chi^2}{7}(2N + 5) \right) \right]. \end{aligned} \quad (1.69)$$

Como ya hemos comentado, los parámetros β y γ son variacionales, lo que significa que los valores $\beta_0 = \beta_0(N)$ y $\gamma_0 = \gamma_0(N)$ que describirán al núcleo que estemos tratando serán aquellos que verifiquen:

$$\left. \frac{\partial E}{\partial \beta} \right|_{\beta=\beta_0} = \left. \frac{\partial E}{\partial \gamma} \right|_{\gamma=\gamma_0} = 0, \quad (1.70)$$

es decir, que la superficie de energía mostrada en la ecuación (1.69) tenga un mínimo en (β_0, γ_0) .

Haciendo este desarrollo para cada una de las cadenas, encontramos:

1. En la cadena de $U(5)$, la superficie de energía es independiente de γ y $E(N; \beta)$ tiene un mínimo en $\beta = 0$.
2. Para la cadena de $O(6)$, la energía sigue siendo independiente de γ y ahora $E(N; \beta)$ tiene un mínimo en $\beta > 0$.
3. En el caso de la cadena de $SU(3)$, $E(N; \beta, \gamma)$ tiene mínimos para $\beta > 0$ y $\gamma = 0$ ó $\gamma = \pi/3$.

Si identificamos los parámetros variacionales (β, γ) con las variables de Hill-Wheeler, introducidas en la ecuación (1.7) en el contexto del modelo colectivo, y que representan deformaciones en la superficie nuclear, podemos asociar cada una de las tres estructuras algebraicas del IBM con una forma del núcleo, como se expone en la Tabla 1.1.

Límite algebraico	β	γ	Forma del núcleo
$U(5)$	0	Independiente	Esférico
$O(6)$	> 0	Independiente	Deformado, γ -inestable
$SU(3)$	> 0	0	Prolado
		$\pi/3$	Oblado

Tabla 1.1: *Identificaciones entre las estructuras algebraicas del IBM y las formas del núcleo en el modelo de Bohr.*

Esta identificación será relevante en la Sección 3, pues también trataremos los isótopos del rutenio en este formalismo, y podremos observar que se produce una transición entre núcleos esféricos y deformados, γ -inestables, en un proceso que es una transición de fase de segundo orden.

1.4. Teoría de transiciones de fase

Como hemos comentado en la motivación del trabajo, aparte de en las introducciones teóricas previas, estudiaremos cómo se da una transición de fase en el núcleo atómico cuando hay un cambio en su forma a lo largo de una línea isotópica. En esta sección, vamos a introducir la base de la teoría de transiciones de fase en sistemas termodinámicos clásicos, y discutiremos cómo se puede adaptar esta teoría a sistemas cuánticos.

1.4.1. Clasificación de Ehrenfest

El primer estudio completo de transiciones de fase en sistemas clásicos proviene de Ehrenfest, quien estudia el comportamiento de la energía libre de Gibbs, G , en los cambios de fase de determinados fluidos. Experimentalmente, se observa que la transición al helio líquido no presenta un calor latente, a diferencia de lo que sucede en otros fluidos. Por ello, podemos sospechar que hay diferencias en el modo en que distintas transiciones de fase tienen lugar, como se plantea en [8].

En la teoría termodinámica, G se expresa en términos de la energía interna, U , la temperatura, T , la entropía, S , la presión, p , y el volumen, v como:

$$G(T, p) = U(T, p) - TS + pv. \quad (1.71)$$

La idea propuesta por Ehrenfest es que podemos hablar de “transiciones de fase de orden n ” cuando alguna de las derivadas de orden n de G presenta una discontinuidad. Con esta formulación, podemos justificar las observaciones experimentales sobre el calor latente, q , que es proporcional a la variación de entropía en el proceso:

$$q \propto \Delta S = S(\text{Fase 2}) - S(\text{Fase 1}). \quad (1.72)$$

Además, de la ecuación (1.71), tenemos:

$$S = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_p. \quad (1.73)$$

Por tanto, una transición como la que hay del vapor de agua al agua líquida sería de primer orden, ya que tendremos que:

$$\left(\frac{\partial G_{\text{agua}}}{\partial T} \right)_p \text{ es discontinua} \Rightarrow q \propto S(\text{Vapor}) - S(\text{Líquido}) = \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{\text{líqu.}} - \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{\text{gas}} \neq 0. \quad (1.74)$$

Sin embargo, el proceso en el que el helio pasa de gas a líquido sería una transición de fase de segundo orden, porque:

$$\left(\frac{\partial G_{\text{He}}}{\partial T} \right)_p \text{ es continua} \Rightarrow q \propto \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{\text{líqu.}} - \left. \frac{\partial G}{\partial T} \right|_{\text{gas}} = 0. \quad (1.75)$$

1.4.2. Teoría de Landau

La teoría de transiciones de fase de Ehrenfest es un éxito a la hora de tratar problemas como el que hemos planteado de la vaporización o, por ejemplo, el de ciertas propiedades magnéticas (entendiendo como transición de fase el paso de un carácter diamagnético a ferromagnético en el entorno de la temperatura de Curie, por ejemplo). Sin embargo, esta formulación no es capaz de explicar ciertas transiciones de fase de segundo orden, como aquellas relacionadas con la superconductividad.

Para tratar con mayor precisión las transiciones de segundo orden, introducimos la teoría de Landau [9]. Para desarrollar el formalismo, trabajamos con la energía libre del sistema, F , que suponemos por simplicidad que depende de un único parámetro de orden, x , y un parámetro de control, y . Además, introducimos la hipótesis de que F es analítica en x y en su derivada.

Si hacemos además ciertas suposiciones de simetría sobre el sistema (que se cumplirán en nuestros estudios), la energía libre sólo dependerá de las potencias pares del parámetro de orden al hacer un desarrollo en serie alrededor de $x = 0$:

$$F(x, y) - F_0(y) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{x=0} x^{2n} \cong a(y)x^2 + \frac{b(y)}{2}x^4. \quad (1.76)$$

La propuesta de Landau es que la condición para que tenga lugar una transición de segundo orden es que el coeficiente de x^2 en el desarrollo anterior sea nulo. Por tanto, el valor del parámetro de control en el que alcanzamos el punto crítico será aquel tal que $a(y_c) = 0$.

En general, para obtener el valor del parámetro de orden del sistema, no tendríamos más que minimizar la energía libre en x . En el caso de que la aproximación hecha en la ecuación (1.76) para $x \ll 1$ sea buena, tenemos:

$$\frac{\partial F}{\partial x} \Big|_{x_0} \cong 2a(y)x_0 + 2b(y)x_0^3 = 0 \Rightarrow \begin{cases} x_0 = 0 \\ x_0^2 = -a(y)/b(y). \end{cases} \quad (1.77)$$

La ecuación anterior presenta una casuística variada y la posible existencia de soluciones no nulas del parámetro de orden está directamente relacionada con la fase en la que se encuentra el sistema, como veremos más adelante en nuestro caso.

1.4.3. Transiciones en sistemas cuánticos

Las descripciones que hemos hecho hasta ahora de las transiciones de fase se basan en análisis en el límite termodinámico. Si bien la teoría de Landau se puede aplicar a sistemas con una descripción cuántica (como puede ser el modelo de Ising, que trata el ferromagnetismo desde un punto de vista de la discretización del momento angular de espín), la posibilidad de aplicar estos formalismos a sistemas puramente cuánticos de tamaño finito, como los núcleos atómicos que tratamos en este trabajo, no es algo directo.

En el caso del núcleo, como introdujimos en la Sección 1.3.4, tenemos una expresión de la energía del sistema en términos de un parámetro variacional, β , y el número de bosones, N . En este modelo, podemos identificar β con el parámetro de orden y N como el parámetro de control. Sin embargo, la naturaleza del sistema hace que la variable N sólo pueda tomar valores enteros positivos; por tanto, al hacer una descripción de los núcleos reales, también habrá un conjunto discreto de posibles valores para β .

Pese a que a lo largo del trabajo usaremos estas descripciones para predecir teóricamente la existencia de transiciones de fase, debemos tener en cuenta que estamos adaptando modelos clásicos o semi-clásicos a descripciones cuánticas, lo que nos lleva a hacer ciertas suposiciones que no son en absoluto obvias como, por ejemplo, la validez de derivar respecto de un parámetro que, a efectos prácticos, es discreto. Por estos motivos, en la literatura, es común encontrar que estas transiciones en sistemas cuánticos se renombren como “precursores de transiciones de fase”, debido a esta falta de adecuación al formalismo.

Capítulo 2

El punto crítico E(5)

En la Sección 1.2 de este trabajo, presentamos el modelo de Bohr-Mottelson, o modelo colectivo, como un formalismo en el que obtener ecuaciones para el núcleo en términos de su geometría, introduciendo los parámetros de deformación β y γ . Obtuvimos la ecuación de Schrödinger general en este tipo de sistemas para, después, particularizar al estudio a núcleos sometidos a potenciales γ -inestables, es decir, independientes del parámetro γ . En este caso, la ecuación de Schrödinger es separable, de forma que tenemos una ecuación diferencial ordinaria para la parte en β , con la forma:

$$\varphi'' + \frac{1}{\beta}\varphi' + \left[\varepsilon - u(\beta) - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2} \right] \varphi = 0. \quad (2.1)$$

A esta ecuación, debemos también imponerle condiciones de contorno. Para la función f , solución de la ecuación original (1.15), estas condiciones son:

$$|f(\beta \rightarrow 0)| < +\infty, \quad f(\beta \rightarrow \infty) = 0. \quad (2.2)$$

Dado que $\varphi = \beta^{3/2}f$, las condiciones de contorno para φ son:

$$\varphi(\beta \rightarrow 0) = \varphi(\beta \rightarrow \infty) = 0. \quad (2.3)$$

En esta sección, propondremos dos potenciales para la ecuación (2.1) y estudiaremos sus implicaciones, además de tratar de trasladar situaciones similares al IBM.

2.1. Modelando el punto crítico: potencial de pozo infinito

A la hora de estudiar potenciales γ -inestables, podemos encontrarnos con dos situaciones claramente diferenciadas: potenciales cuyo mínimo absoluto esté en $\beta = 0$ o en $\beta > 0$. Desde el punto de vista de la geometría del núcleo, esta diferencia es esencial, pues el primer caso nos da un núcleo esférico, mientras que el segundo implica tener un núcleo deformado, γ -inestable.

En esta sección, no vamos a tratar ninguno de esos dos extremos, sino la transición entre uno y otro. Queremos resolver la ecuación (2.1) para un potencial que, de una forma u otra, represente el punto crítico en el que un núcleo pasa de ser esférico a ser deformado, todo mientras mantiene la independencia de γ .

En la Figura 2.1, tratamos de ilustrar esta transición: vemos cómo $u(\beta) = \beta^2$ nos daría un núcleo esférico, mientras que $u(\beta) = -\beta^2 + \beta^4/2$ correspondería a una situación deformada. En esta primera

aproximación al problema, vamos a seguir la propuesta de [10], modelando el cambio mediante el potencial de pozo infinito, también representado en la Figura 2.1.

Por tanto, vamos a centrarnos en el análisis de las soluciones de la ecuación (2.1) en el caso de que el potencial propuesto tenga la forma:

$$u(\beta) = \begin{cases} 0, & \beta \leq \beta_w, \\ +\infty, & \beta > \beta_w. \end{cases} \quad (2.4)$$

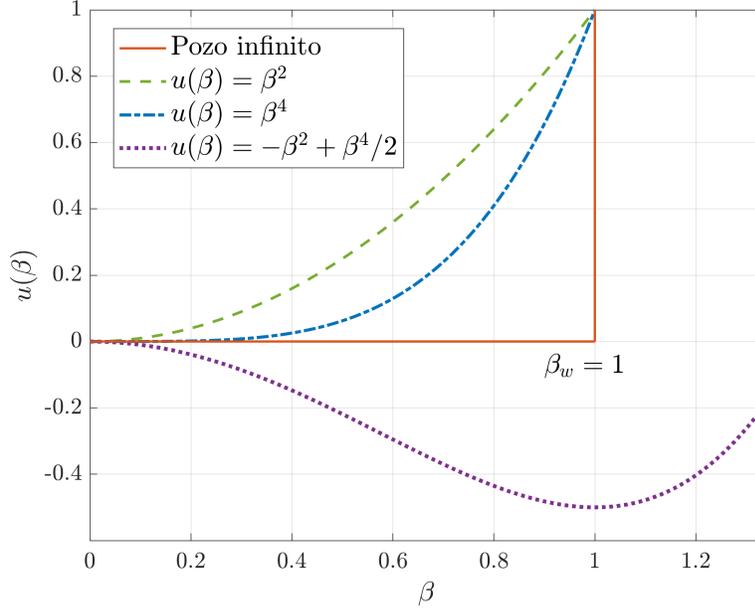


Figura 2.1: Representación de varios potenciales independientes de γ , ilustrando la transición de un núcleo esférico a uno deformado.

Sin embargo, antes de resolver la ecuación, merece la pena discutir otro de sus términos. Si nos fijamos en el último sumando del factor en φ , podemos notar que tiene una forma análoga al potencial centrífugo que estudiamos en la resolución de potenciales centrales tridimensionales:

$$-\frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2} \longleftrightarrow -\frac{l(l+1)}{r^2}. \quad (2.5)$$

En la Figura 2.2, representamos la superposición del término centrífugo y del potencial de pozo infinito para $\beta_w = 1$. Con ella, podemos inferir la relevancia que tiene la elección del parámetro β_w del pozo infinito: si hiciéramos $\beta_w < 1$, el término centrífugo ganaría más importancia, lo que acercaría al sistema más a un rotor puro.

Procedemos ahora a la resolución de la ecuación (2.1). En el caso de que el potencial tenga la forma propuesta en la ecuación (2.4) de pozo infinito, la ecuación toma la siguiente forma:

$$\varphi'' + \frac{1}{\beta}\varphi' + \left[\varepsilon - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2} \right] \varphi = 0, \quad 0 \leq \beta \leq \beta_w, \quad (2.6)$$

Con condiciones de contorno:

$$\varphi(0) = \varphi(\beta_w) = 0. \quad (2.7)$$

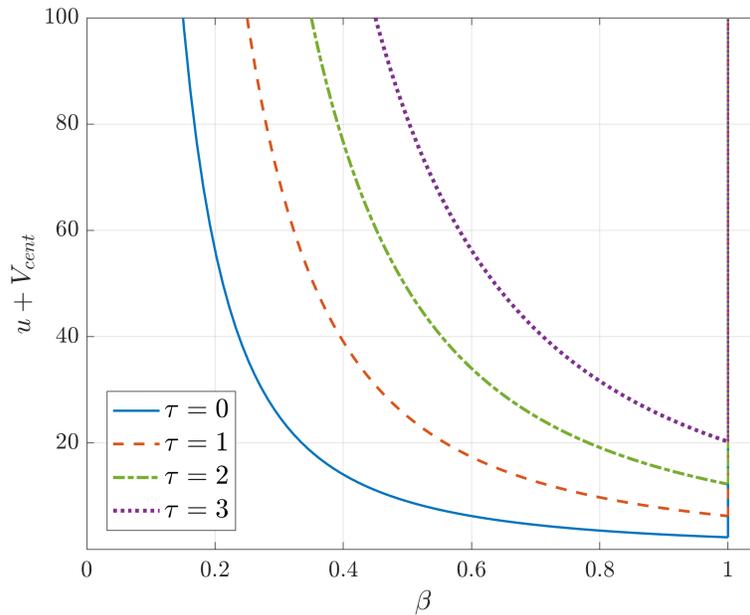


Figura 2.2: Suma del término centrífugo y del potencial de pozo infinito, para $\beta_w = 1$.

Si introducimos el cambio de variable $z = \varepsilon^{1/2}\beta = k\beta$, con $\tilde{\varphi}(z) = \varphi(\beta)$, la ecuación (2.6) resulta:

$$\tilde{\varphi}'' + \frac{1}{z}\tilde{\varphi}' + \left[1 - \frac{(\tau + 3/2)^2}{z^2}\right]\tilde{\varphi} = 0, \quad \tilde{\varphi}(0) = \tilde{\varphi}(k\beta_w) = 0. \quad (2.8)$$

Es inmediato reconocer que la ecuación anterior es una ecuación de Bessel, con parámetro $\nu = \tau + 3/2$. La solución general de la ecuación será, por tanto, combinación de las funciones de Bessel de primera y segunda especie:

$$\tilde{\varphi}(z) = A_1 J_{\tau+3/2}(z) + A_2 Y_{\tau+3/2}(z). \quad (2.9)$$

De las condiciones de contorno impuestas, obtenemos:

$$|\tilde{\varphi}(0)| = 0 < +\infty \Rightarrow A_2 = 0 \quad (2.10)$$

$$\varphi(\beta_w) = 0 \Rightarrow J_{\tau+3/2}(z_w) = J_{\tau+3/2}(k\beta_w) = 0 \quad (2.11)$$

La igualdad (2.11) es especialmente importante, pues nos determina las energías del sistema. En efecto, imponer esa igualdad nos lleva a:

$$J_{\tau+3/2}(k\beta_w) = 0 \Rightarrow k_{\xi,\tau} = \frac{x_{\xi,\tau}}{\beta_w}, \quad (2.12)$$

donde $x_{\xi,\tau}$ es el ξ -ésimo cero de $J_{\tau+3/2}(z)$. De aquí y de la definición que hicimos de $\varepsilon = k^2$, tenemos los siguientes valores de energías:

$$E_{\xi,\tau} = \frac{\hbar^2}{2B_2} k_{\xi,\tau}^2 = \frac{\hbar^2}{2B_2} \left(\frac{x_{\xi,\tau}}{\beta_w}\right)^2. \quad (2.13)$$

Volviendo a las funciones de onda, hemos obtenido que las soluciones de la ecuación son:

$$\varphi_{\xi,\tau}(\beta) = C_{\xi,\tau} J_{\tau+3/2}(k_{\xi,\tau}\beta) \Rightarrow f_{\xi,\tau}(\beta) = C_{\xi,\tau} \beta^{-3/2} J_{\tau+3/2}(k_{\xi,\tau}\beta), \quad (2.14)$$

donde $C_{\xi,\tau}$ es una constante de normalización. Para calcularla, debemos imponer que $\langle f_{\xi,\tau} | f_{\xi,\tau} \rangle = 1$. Haciendo esto:

$$\begin{aligned} 1 &= \int_0^{\beta_w} |f_{\xi,\tau}(\beta)|^2 \beta^4 d\beta = |C_{\xi,\tau}|^2 \int_0^{\beta_w} \beta J_{\tau+3/2}^2(k_{\xi,\tau}\beta) d\beta = \left[\begin{array}{l} z = \beta/\beta_w \\ d\beta = \beta_w dz \end{array} \right] = \\ &= |C_{\xi,\tau}|^2 \beta_w^2 \int_0^1 z J_{\tau+3/2}^2(x_{\xi,\tau}z) dz. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Ahora, podemos usar la siguiente propiedad de las funciones de Bessel:

$$\int_0^1 z J_\alpha(x_{\alpha,m}z) J_\alpha(x_{\alpha,n}z) dz = \frac{\delta_{mn}}{2} J_{\alpha+1}^2(x_{\alpha,m}). \quad (2.16)$$

En el caso particular de $n = m$, la ecuación anterior resulta en lo siguiente:

$$\int_0^1 z J_\alpha^2(x_{\alpha,m}z) dz = \frac{J_{\alpha+1}(x_{\alpha,m})}{2}. \quad (2.17)$$

Podemos sustituir este resultado en la ecuación (2.15), obteniendo:

$$1 = \frac{1}{2} |C_{\xi,\tau}|^2 \beta_w^2 J_{\tau+5/2}^2(x_{\xi,\tau}) \Rightarrow C_{\xi,\tau} = \frac{\sqrt{2}}{\beta_w} |J_{\tau+5/2}(x_{\xi,\tau})|^{-1}, \quad (2.18)$$

donde hemos tomado las constantes de normalización positivas y reales.

Usando el resultado de la ecuación (2.18), podemos escribir la forma completa de las funciones de onda en $f(\beta)$ como:

$$f_{\xi,\tau}(\beta) = \frac{\sqrt{2}}{\beta_w} |J_{\tau+5/2}(x_{\xi,\tau})|^{-1} \beta^{-3/2} J_{\xi,\tau}(k_{\xi,\tau}\beta). \quad (2.19)$$

Por tanto, las funciones de onda en β son modificaciones de las funciones de Bessel. Dado que las funciones de Bessel son base de una representación del grupo euclídeo, y estamos tratando con un espacio de 5 dimensiones, llamaremos a este estado del núcleo la simetría $E(5)$.

En las Figuras 2.3, 2.4 y 2.5, representamos las funciones $\beta^2 f_{\xi,\tau}$ para los primeros valores de τ y ξ . Para evitar la dependencia del parámetro β_w , se representa $\beta^2 f_{\xi,\tau} \beta_w^{5/2}$ en función de β/β_w . Podemos notar en ellas que la función $f_{\xi,\tau}$ tiene una cantidad de $\xi - 1$ ceros en el intervalo $(0, \beta_w)$. Vemos aquí el paralelismo con el número cuántico principal n de las funciones de onda del átomo de hidrógeno, ya que la parte radial de $\Phi_{n,l,m}$ tiene n ceros. Además, observamos que, al aumentar el número τ , las funciones de onda se desplazan hacia la derecha, al igual que ocurre en el caso del potencial centrífugo, como se puede ver en la Figura 2.2.

Como hemos demostrado en la ecuación (2.13), el espectro de energías (y, en general, los observables) dependerá de los ceros de funciones de Bessel. En la Tabla 2.1, se incluyen algunos de los primeros ceros necesarios, calculados numéricamente.

$x_{\xi,\tau}$	$\xi = 1$	$\xi = 2$	$\xi = 3$	$\xi = 4$
$\tau = 0$	4,4934	7,7253	10,9041	14,0662
$\tau = 1$	5,7635	9,0950	12,3229	15,5146
$\tau = 2$	6,9879	10,4171	13,6980	16,9236
$\tau = 3$	8,1826	11,7049	15,0397	18,3013

Tabla 2.1: Ceros de las funciones de Bessel, $x_{\xi,\tau}$, para $\xi = 1, \dots, 4$ y $\tau = 0, \dots, 3$.

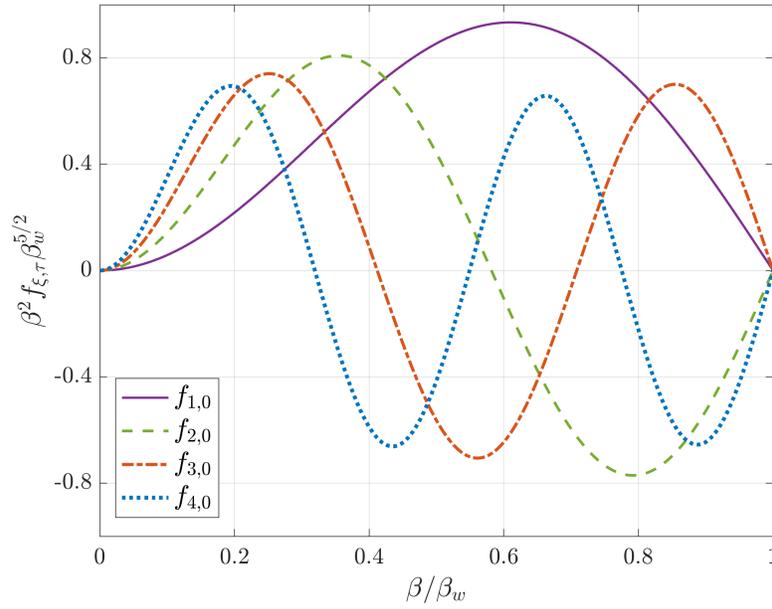


Figura 2.3: Funciones de onda $f_{\xi,\tau}$, solución de la ecuación (1.15), para $\xi = 1, \dots, 4$ y $\tau = 0$.

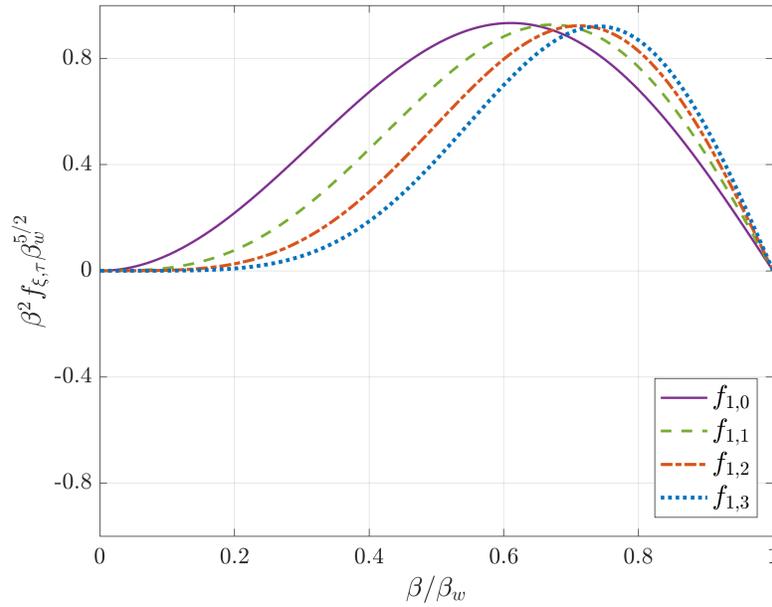


Figura 2.4: Funciones de onda $f_{\xi,\tau}$, solución de la ecuación (1.15), para $\xi = 1$ y $\tau = 0, \dots, 3$.

En la ecuación (2.13), podemos ver que el valor concreto de las energías depende de la anchura que le impongamos al pozo, β_w , además del parámetro de masa, B_2 . Para hacer un análisis de estructura, podemos dar energías reducidas, en unidades del primer estado excitado, de forma que eliminamos estas dependencias:

$$e_{\xi,\tau} = \frac{E_{\xi,\tau} - E_{1,0}}{E_{1,1} - E_{1,0}} = \frac{x_{\xi,\tau}^2 - x_{1,0}^2}{x_{1,1}^2 - x_{1,0}^2}. \quad (2.20)$$

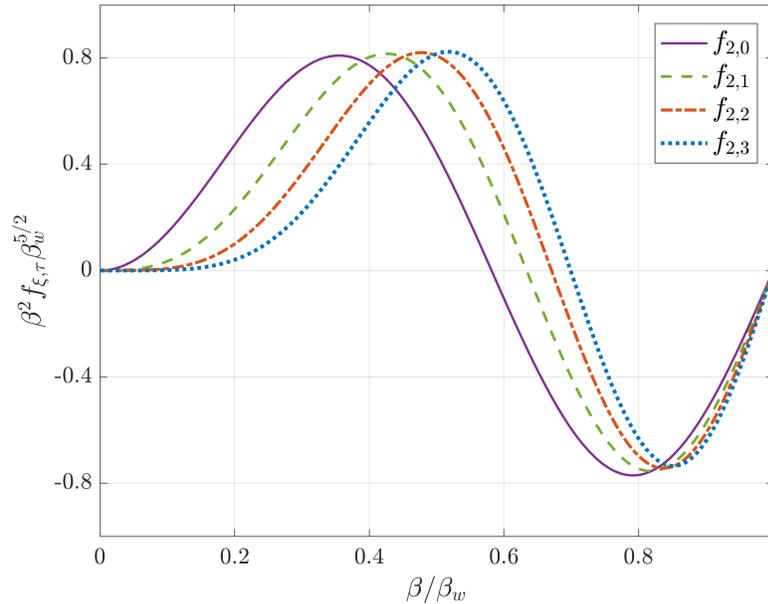


Figura 2.5: Funciones de onda $f_{\xi,\tau}$, solución de la ecuación (1.15), para $\xi = 2$ y $\tau = 0, \dots, 3$.

De esta forma, podemos obtener las energías de excitación para el punto crítico $E(5)$, expuestas en la Tabla 2.2.

$e_{\xi,\tau}$	$\xi = 1$	$\xi = 2$	$\xi = 3$	$\xi = 4$
$\tau = 0$	0	3,0314	7,5774	13,6387
$\tau = 1$	1	4,8000	10,1072	16,9277
$\tau = 2$	2,1986	6,7803	12,8540	20,4363
$\tau = 3$	3,5898	8,9673	15,8137	24,1615

Tabla 2.2: Energías propias (reducidas) del sistema, $e_{\xi,\tau}$, para $\xi = 1, \dots, 4$ y $\tau = 0, \dots, 3$.

De la Tabla 2.2, es importante destacar el valor $e_{1,2}$, ya que éste se corresponde con el conocido como ratio 4/2, cuyo valor es relevante al estudiar los núcleos par-par y nos permite caracterizar el potencial al que está sometido el núcleo. En la Tabla 2.3, recogemos algunos otros ratios de energías que usaremos para comparar con otros resultados obtenidos a lo largo del trabajo.

$E_{41,2}/E_{21,1}$	$E_{02,0}/E_{21,1}$	$E_{01,3}/E_{21,1}$	$E_{02,0}/E_{01,3}$
2.20	3.03	3.59	0.84

Tabla 2.3: Algunos ratios de energías relevantes en la simetría $E(5)$.

Otro observable de gran relevancia en el estudio de estos núcleos son los ratios de transición electromagnética. Para calcularlos, siguiendo el procedimiento de [11], primero reescribimos los autoestados del hamiltoniano de Bohr en la base de un núcleo γ -inestable como:

$$\Psi(\beta, \gamma, \theta_i) = f_{\xi,\tau}(\beta) \Phi_{L,M}^{\tau,\nu}(\gamma, \theta_i) \equiv |\xi, \tau, \nu, L, M\rangle. \quad (2.21)$$

El operador que nos interesa en los núcleos estudiados es el cuadrupolar, que tiene las componentes:

$$T_{\mu}^{(E2)} = t\alpha_{2,\mu} = t\beta \underbrace{\left[\cos \gamma \mathcal{D}_{\mu,0}^2 + \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \gamma (\mathcal{D}_{\mu,2}^2 + \mathcal{D}_{\mu,-2}^2) \right]}_{Q_{2\mu}}, \quad \mu = 0, \pm 1, \pm 2. \quad (2.22)$$

Así, la tasa de transición de un estado $|\xi, \tau, \nu, L, M\rangle$ a uno $|\xi', \tau', \nu', L', M'\rangle$ será:

$$B(E2; \xi, \tau, L, M \rightarrow \xi', \tau', L', M') = \frac{|\langle \xi, \tau, L || T^{(E2)} || \xi', \tau', L' \rangle|^2}{2L+1}, \quad (2.23)$$

donde hemos introducido el símbolo $\langle \xi, \tau, L || T^{(E2)} || \xi', \tau', L' \rangle$ para representar el elemento de matriz reducido en $O(3)$ del operador $T^{(E2)}$. La definición de estos elementos de matriz vienen de la suposición de que no dependen de las proyecciones del momento angular M, M' . Podemos relacionar el elemento de matriz reducido con el “convencional” mediante coeficientes de Clebsch-Gordan, según el Teorema de Wigner-Eckart. Este teorema, siguiendo el criterio de [11], nos dice que, para un tensor esférico $W_{\mu}^{(j)}$, sus elementos de matriz se relacionan mediante la expresión:

$$\langle \beta J_2 M_2 | W_{\mu}^{(j)} | \alpha J_1 M_1 \rangle = \langle J_1 M_1 j \mu | J_2 M_2 \rangle \frac{\langle \beta J_2 || W^{(j)} || \alpha J_1 \rangle}{\sqrt{2J_2+1}}. \quad (2.24)$$

En la ecuación (2.23), hemos ignorado la etiqueta ν , ya que, como hemos dicho antes, esta proviene de la multiplicidad de la reducción $O(5) \supset O(3)$ y solo tiene relevancia para momentos angulares $L \geq 6$.

Como ya hemos dicho, en la ecuación (2.23) hemos introducido el elemento de matriz reducido en $O(3)$. Para simplificar el cálculo con un tratamiento algebraico, introducimos análogamente los elementos de matriz reducidos de $O(5)$:

$$\bar{B}(E2; \xi, \tau \rightarrow \xi', \tau') = \frac{|\langle \xi, \tau || T^{(E2)} || \xi', \tau' \rangle|^2}{2L+1}. \quad (2.25)$$

Podemos calcular este nuevo tipo de elemento de matriz mediante la correspondiente generalización del Teorema de Wigner-Eckart: dado un operador tensorial esférico sobre $O(5)$, $\hat{T}_{\alpha,L,M}^v$, se tiene:

$$\langle v_i \alpha_i L_i M_i | \hat{T}_{\alpha,L,M}^v | v_f \alpha_f L_f M_f \rangle = \langle v_f \alpha_f L_f M_f, v \alpha L M | v_i \alpha_i L_i M_i \rangle \times \langle v_i || \hat{T}^v || v_f \rangle. \quad (2.26)$$

El objetivo es simplificar lo enunciado en la ecuación (2.26), combinando este teorema con la versión enunciada para operadores sobre $O(3)$. Para ello, y siguiendo de nuevo el criterio de [11], definimos los coeficientes de Clebsch-Gordan de $O(5)$ reducidos en $O(3)$ como:

$$\langle v_f \alpha_f L_f M_f, v \alpha L M | v_i \alpha_i L_i M_i \rangle = \langle L_f M_f L M | L_i M_i \rangle \langle v_f \alpha_f L_f, v \alpha L || v_i \alpha_i L_i \rangle. \quad (2.27)$$

Usando el Teorema de Wigner-Eckart usual para $O(3)$, el enunciado en (2.26) para $O(5)$ y la identidad entre coeficientes de la ecuación (2.27), podemos relacionar los elementos de matriz reducidos como:

$$\frac{\langle v_i \alpha_i L_i || \hat{T}_{\alpha L}^v || v_f \alpha_f L_f \rangle}{\sqrt{2L_i+1}} = \langle v_f \alpha_f L_f, v \alpha L || v_i \alpha_i L_i \rangle \times \langle v_f || \hat{T}^v || v_i \rangle. \quad (2.28)$$

Teniendo en cuenta estas relaciones, podemos determinar el ratio de transición definido en la ecuación (2.23) a partir del ratio reducido de la ecuación (2.25) como sigue:

$$B(E2; \xi, \tau, L, M \rightarrow \xi', \tau', L', M') = \langle \tau' \alpha' L', 112 || \tau \alpha L \rangle^2 \times \bar{B}(E2; \xi, \tau \rightarrow \xi', \tau'). \quad (2.29)$$

Notemos que, en particular, no hay ninguna dependencia de las proyecciones de espín M, M' , con lo que las eliminamos de la notación.

Para los estados considerados, tal y como se demuestra en [11], los elementos de matriz reducidos tienen la forma:

$$\overline{B}(E2; \xi, \tau \rightarrow \xi', \tau') = t^2 |I_{\xi, \tau; \xi', \tau'}|^2 \times \left[\delta_{\tau', \tau-1} \frac{\tau}{2\tau+3} + \delta_{\tau', \tau+1} \frac{\tau+3}{2\tau+3} \right] \quad (2.30)$$

En la ecuación anterior, hemos introducido la integral $I_{\xi, \tau; \xi', \tau'}$, definida como:

$$I_{\xi, \tau; \xi', \tau'} = \langle \xi, \tau | \beta | \xi', \tau' \rangle = \int_0^{\beta_w} f_{\xi, \tau}^*(\beta) \beta f_{\xi', \tau'}(\beta) \beta^4 d\beta. \quad (2.31)$$

Usando la forma de las funciones $f(\beta)$ y haciendo el cambio de variable usado en la ecuación (2.15) de $z = \beta/\beta_w$, llegamos a la forma general de las integrales

$$I_{\xi, \tau; \xi', \tau'} = 2\beta_w |J_{\tau+5/2}(x_{\xi, \tau})|^{-1} |J_{\tau'+5/2}(x_{\xi', \tau'})|^{-1} \int_0^1 z^2 J_{\tau+3/2}(x_{\xi, \tau} z) J_{\tau'+3/2}(x_{\xi', \tau'} z) dz. \quad (2.32)$$

A diferencia de lo que ocurrió con la constante de normalización, no hay simplificación al caso general de estas integrales, y deberemos calcularlas numéricamente.

Una integral relevante es la de la transición $2_{1,1} \rightarrow 0_{1,0}$, ya que expresaremos los ratios de transición en unidades de esta. El valor de esta integral es:

$$I_{1,1;1,0} = 2\beta_w |J_{7/2}(x_{1,1})|^{-1} |J_{5/2}(x_{1,0})|^{-1} \int_0^1 z^2 J_{5/2}(x_{1,1} z) J_{3/2}(x_{1,0} z) dz \approx 0,6104\beta_w. \quad (2.33)$$

Como se ha comentado antes, expresaremos los ratios de transición adimensionalmente, de forma que la transición $2_{1,1} \rightarrow 0_{1,0}$ tenga un valor 100, ya que esto nos permite obtener resultados independientes del factor de escala t del operador cuadrupolar eléctrico y de β_w . Definimos entonces los ratios reducidos como:

$$\lambda(L_{\xi, \tau} \rightarrow L'_{\xi', \tau'}) \equiv \lambda(\xi, \tau, L; \xi', \tau', L') = \frac{B(E2; \xi, \tau, L \rightarrow \xi', \tau', L')}{B(E2; 1, 1, 2 \rightarrow 1, 0, 0)} \times 100. \quad (2.34)$$

La forma de estos ratios será, entonces:

$$\lambda(L_{\xi, \tau} \rightarrow L'_{\xi', \tau'}) = 500 \langle v' \alpha' L', 112 || v \alpha L \rangle^2 \left(\frac{I_{\xi, \tau; \xi', \tau'}}{I_{1,1;1,0}} \right)^2 \times \left[\delta_{\tau', \tau-1} \frac{\tau}{2\tau+3} + \delta_{\tau', \tau+1} \frac{\tau+3}{2\tau+3} \right]. \quad (2.35)$$

En la Tabla 2.4, recogemos algunos cocientes de ratios de transición que compararemos con los obtenidos en otros modelos más adelante.

$\lambda(4_{1,2} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(0_{2,0} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(2_{1,2} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(6_{1,3} \rightarrow 4_{1,2})$
167	86	167	217

Tabla 2.4: Algunos ratios de transición reducidos (en unidades de la transición $2_{1,1} \rightarrow 0_{1,0}$, tomando ésta el valor 100) relevantes en la simetría $E(5)$.

Una vez hemos calculado las energías y los ratios de transición del sistema, podemos representarlos en un espectro como el que se presenta en la Figura 2.6. Este espectro contiene gran cantidad de información sobre la simetría $E(5)$ y será comparado con los que obtengamos en otras circunstancias.

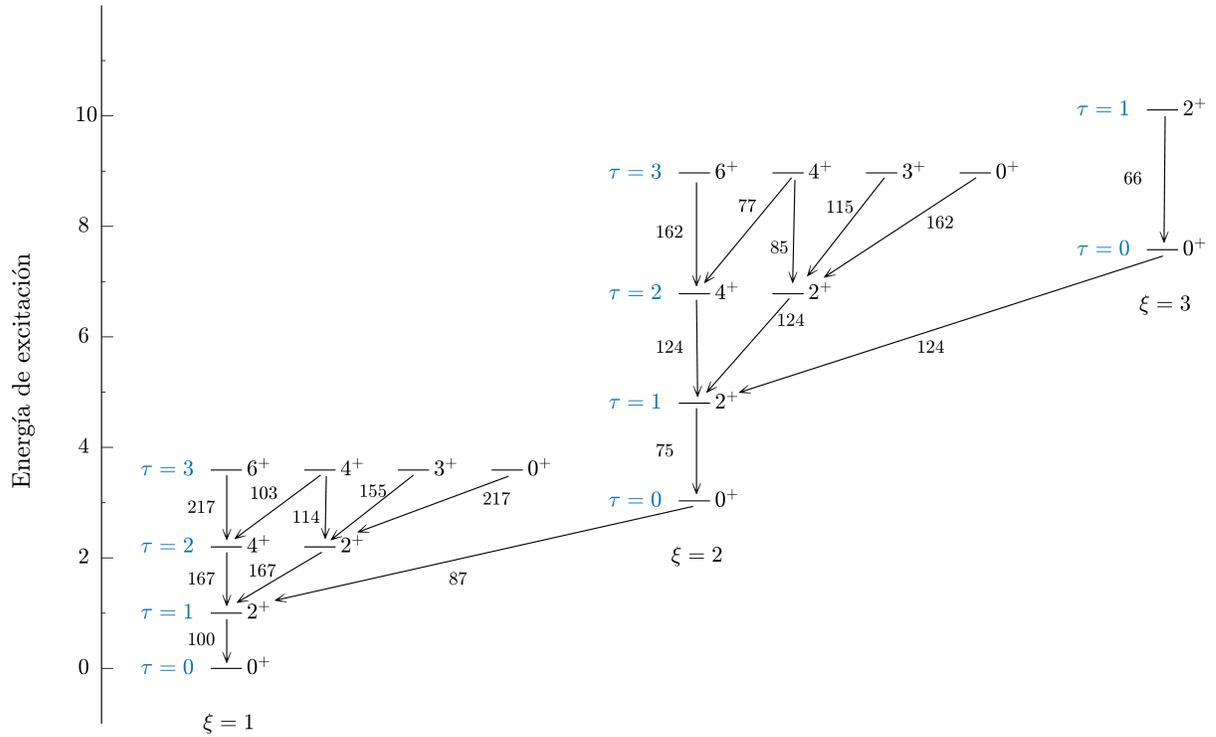


Figura 2.6: Espectro esquemático de la simetría E(5). Los números cercanos a las flechas entre estados indican los ratios de transición cuadrupolar eléctrica reducidos, $\lambda(L_{\xi,\tau} \rightarrow L'_{\xi',\tau'})$.

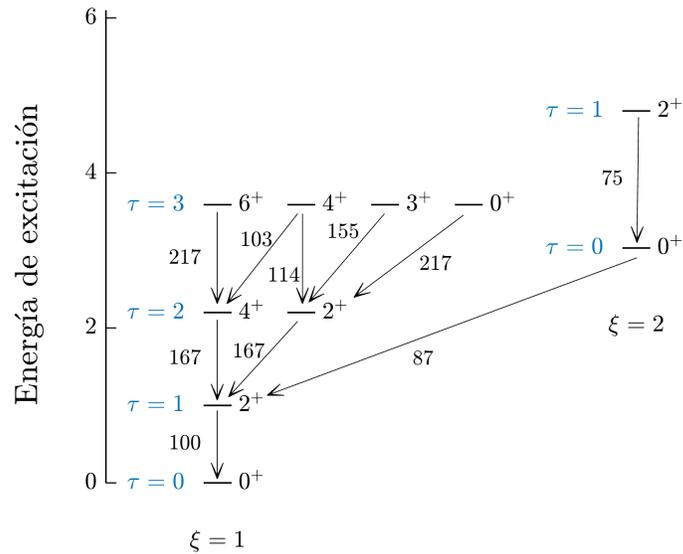


Figura 2.7: Detalle de la Figura 2.6, mostrando los estados de la primera banda y el inicio de la segunda.

2.2. Otras aproximaciones al punto crítico

En la sección anterior, hemos resuelto el problema del hamiltoniano de Bohr-Mottelson en el caso de un potencial que modela la transición entre un núcleo esférico y un núcleo deformado, γ -inestable. Según lo que estudiamos en la Sección 1.3.4, podemos relacionar esta transición con la clase transicional $O(6) - U(5)$. En esta sección, vamos a estudiar, siguiendo las ideas de [12], cómo se comporta esta clase transicional de forma simplificada en el formalismo de estados coherentes y qué podemos esperar sobre el punto crítico. Además, estudiaremos las diferencias entre las predicciones que hace el IBM y el modelo de Bohr en el punto crítico.

2.2.1. El punto crítico en el formalismo de estados coherentes

Vamos a tratar de modelar la transición de fase $E(5)$ en el formalismo de estados coherentes. Primero, recordemos que podemos identificar cada cadena de álgebras en el IBM con sus operadores de Casimir. Los operadores asociados a los álgebras $U(5)$ y $O(6)$ son:

$$\mathcal{C}_1[U(5)] = \hat{n}_d, \quad \mathcal{C}_2[O(6)] = 2[\hat{N}(\hat{N} + 4) - 4\hat{\mathcal{P}}^\dagger \cdot \hat{\mathcal{P}}]. \quad (2.36)$$

Si obviamos el término $\hat{N}(\hat{N} + 4)$, que sólo aporta un cambio en el origen de energías al variar del número de bosones, podemos modelar el hamiltoniano de la transición $O(5) - U(6)$ como:

$$H_x = x\hat{n}_d + \frac{1-x}{N-1}\hat{\mathcal{P}}^\dagger \cdot \hat{\mathcal{P}}, \quad x \in [0, 1]. \quad (2.37)$$

El hamiltoniano de la ecuación anterior es claramente el mismo que presentamos en la ecuación (1.33), tomando $\varepsilon_d = x$, $\kappa_0 = (1-x)/(N-1)$ y el resto de parámetros idénticamente nulos. Merece la pena comentar que el motivo por el que no tomamos $\kappa_0 = 1-x$ es porque el factor $1/(N-1)$ da cuenta de las variaciones por tamaño finito al trabajar con la transición de fase.

En esta situación, la energía del sistema en el formalismo de estados coherentes se obtiene trivialmente con la nueva definición de los parámetros a partir de la ecuación (1.69):

$$E_x(N; \beta) = N \left[\frac{x\beta^2}{1+\beta^2} + \frac{1-x}{4} \left(\frac{1-\beta^2}{1+\beta^2} \right)^2 \right]. \quad (2.38)$$

Según hemos discutido en la Sección 1.4, la condición para que se dé la situación de encontrarse en el punto crítico es:

$$\left. \frac{\partial^2 E_{x_c}}{\partial \beta^2} \right|_{\beta=0} = 0 \Rightarrow x_c = 1/2. \quad (2.39)$$

En este caso, haciendo un desarrollo alrededor de $\beta = 0$ de la expresión (2.38), tenemos:

$$E_{x_c}(N; \beta) - E_{x_c}(N; 0) \approx \sum_{n=1}^4 \frac{1}{n!} \left. \frac{\partial^n E_{x_c}}{\partial \beta^n} \right|_{\beta=0} \beta^n = \frac{N\beta^4}{2} \propto \beta^4, \quad (2.40)$$

donde hemos usado que $[\partial^n E_{x_c}/\partial \beta^n]_{\beta=0} = 0$ para $n = 1, 2, 3$, y $[\partial^4 E_{x_c}/\partial \beta^4]_{\beta=0} = 12N$. En la Figura 2.8, podemos observar la energía descrita por la ecuación (2.38) para varios valores de x , fijando $N = 8$, junto con la curva $E = 4\beta^4$, que, según (2.40), es la dependencia en el punto crítico.

Observamos que la predicción que obtenemos en este formalismo para la transición de fase no coincide con lo planteado en el modelo de Bohr: pasamos de un potencial de pozo infinito, a uno de la forma β^4 . Por ello, en la literatura se conoce a esta situación como punto crítico $e(5)$, ya que no reproduce exactamente la propuesta que hicimos en la sección anterior.

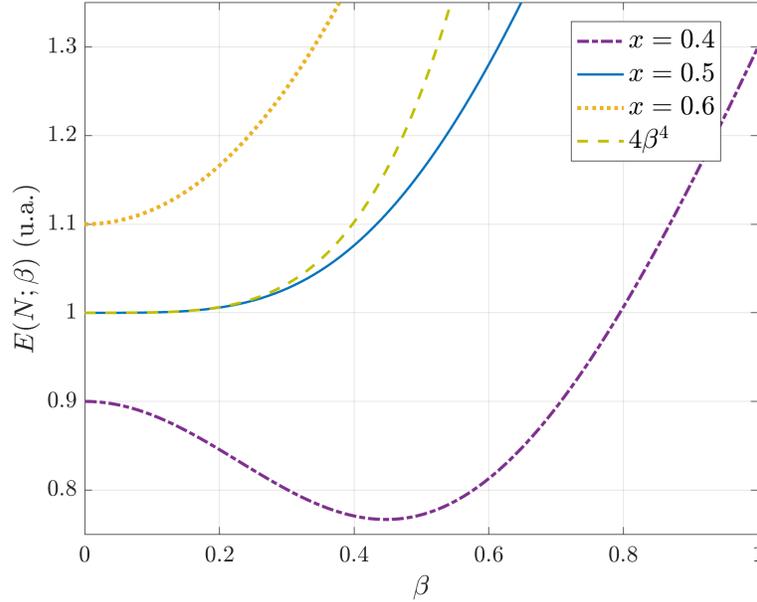


Figura 2.8: Representación de las curvas de energía descritas por la ecuación (2.38), con $N = 8$, para varios valores de x , junto con la dependencia calculada en el punto crítico.

2.2.2. El potencial β^4 en el modelo colectivo

Como ya hemos visto y comentado, la dependencia de la energía predicha por el formalismo de estados coherentes para el punto crítico es del tipo β^4 , frente al pozo infinito propuesto en la Sección 2.1. Sin embargo, como podemos ver en la Figura 2.9, el potencial β^4 sirve como una buena aproximación al pozo infinito en el límite de β pequeño, dando una transición más “suave”, con lo que podemos plantearnos el calcular las soluciones para un núcleo descrito mediante el modelo de Bohr-Mottelson sometido a un potencial de la forma $u(\beta) = \beta^4$.

Por tanto, consideramos ahora una ecuación como (2.1), que ahora toma la forma:

$$\varphi'' + \frac{1}{\beta}\varphi' + \left[\varepsilon - \beta^4 - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2} \right] \varphi = 0, \quad \varphi(0) = \varphi(+\infty) = 0. \quad (2.41)$$

A diferencia de lo que sucedía en el potencial de pozo infinito, esta ecuación no tiene soluciones analíticas, luego debemos hacer la resolución numéricamente. Los detalles de esta resolución, por el método de diferencias finitas, se incluyen en el Anexo C.

Como comentamos en la Sección 2.1, hay ciertos valores de energías y ratios de transición especialmente útiles para hacer una comparación rápida entre distintos modelos nucleares. En las Tablas 2.5 y 2.6, exponemos algunos de estos valores en el potencial β^4 , comparando con los obtenidos para la simetría $E(5)$. Podemos observar en estas tablas que hay diferencias significativas entre los resultados predichos en el punto crítico $E(5)$ y en el potencial β^4 . Sin embargo, estas diferencias adquirirán mayor relevancia cuando comparemos con los resultados obtenidos en otros potenciales (como haremos en la sección siguiente) o los calculados en el IBM.

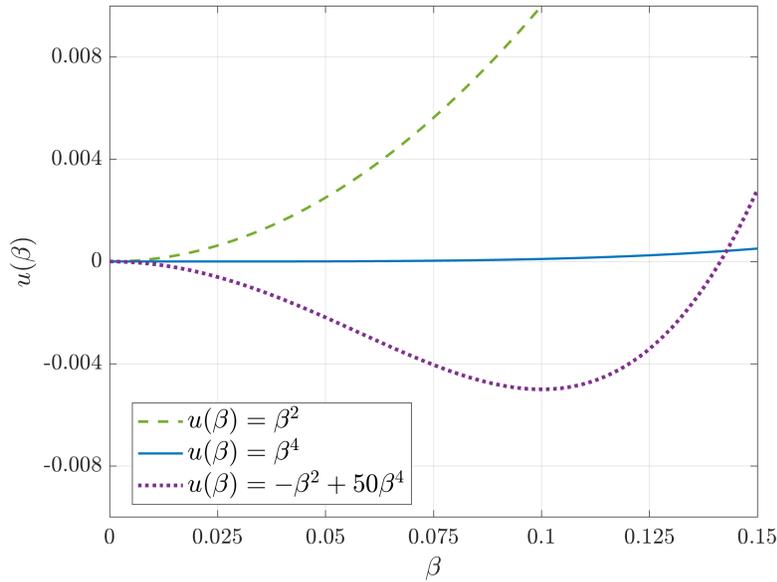


Figura 2.9: Representación de varios potenciales independientes de γ , ilustrando la transición de un núcleo esférico a uno deformado en el rango de $\beta \ll 1$.

	$E_{4_{1,2}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{2,0}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{1,3}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{2,0}}/E_{0_{1,3}}$
$E(5)$	2.20	3.03	3.59	0.84
β^4	2.09	2.39	3.27	0.73

Tabla 2.5: Algunos ratios de energías relevantes en la simetría $E(5)$ y el potencial β^4 .

	$\lambda(4_{1,2} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(0_{2,0} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(2_{1,2} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(6_{1,3} \rightarrow 4_{1,2})$
$E(5)$	167	86	167	217
β^4	183	141	183	256

Tabla 2.6: Algunos ratios de transición reducidos (en unidades de la transición $2_{1,1} \rightarrow 0_{1,0}$, tomando ésta el valor 100) relevantes en la simetría $E(5)$ y el potencial β^4 .

Con el objetivo de comparar mejor los potenciales, incluimos en las Figuras 2.10 y 2.11 el espectro del núcleo en el potencial β^4 , que podemos comparar con el espectro de la simetría $E(5)$ que veíamos en las Figuras 2.6 y 2.7. Observamos en esta comparación que el potencial β^4 predice, en general, una separación menor en energías entre los niveles.

Como último comentario al potencial β^4 , podemos ver una representación de las funciones de onda con $\tau = 0$ en la Figura 2.12. Si comparamos con la Figura 2.3, donde representábamos esas funciones en el pozo infinito, observamos que la estructura de las soluciones es extremadamente similar: se sigue manteniendo la relación entre ξ y el número de ceros y hay un “desplazamiento” a la izquierda según aumentamos este número cuántico. Una diferencia a destacar es que, en este caso, las funciones de onda no llegan a anularse en el dominio donde las representamos, ya que la condición es $f(\beta \rightarrow \infty) = 0$, frente a lo que sucedía en el pozo infinito, donde las soluciones son idénticamente nulas para $\beta > \beta_w$.

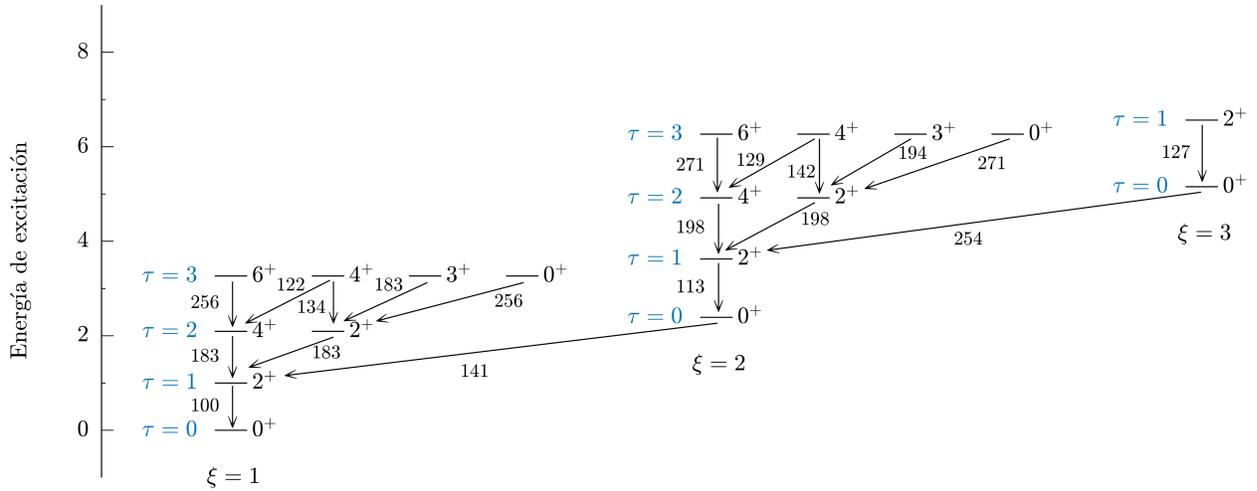


Figura 2.10: Espectro esquemático del núcleo en el potencial $u(\beta) = \beta^4$. Los números cercanos a las flechas entre estados indican los ratios de transición cuadrupolar eléctrica reducidos, $\lambda(L_{\xi, \tau} \rightarrow L'_{\xi', \tau'})$.

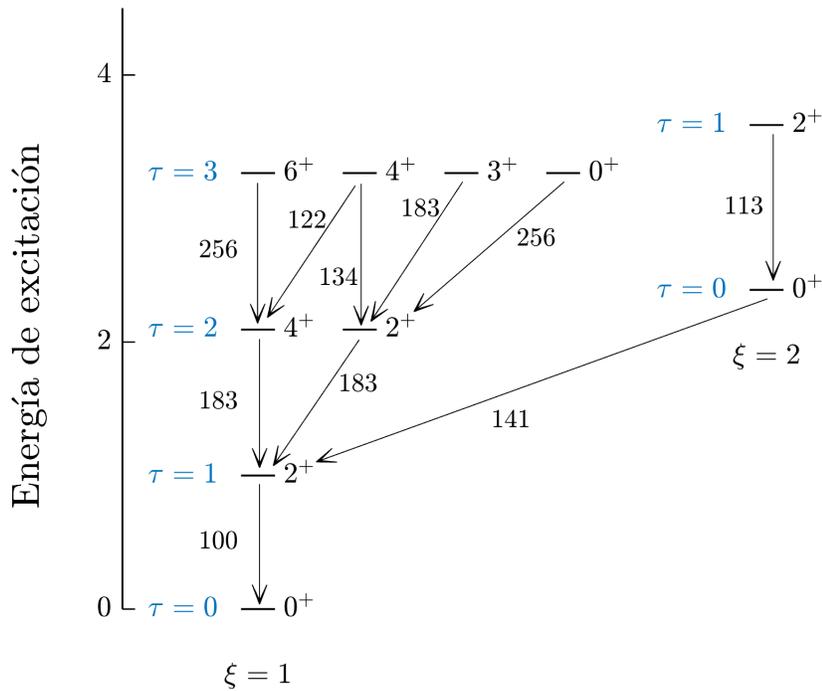


Figura 2.11: Detalle de la Figura 2.10, mostrando los estados de la primera banda y el inicio de la segunda.

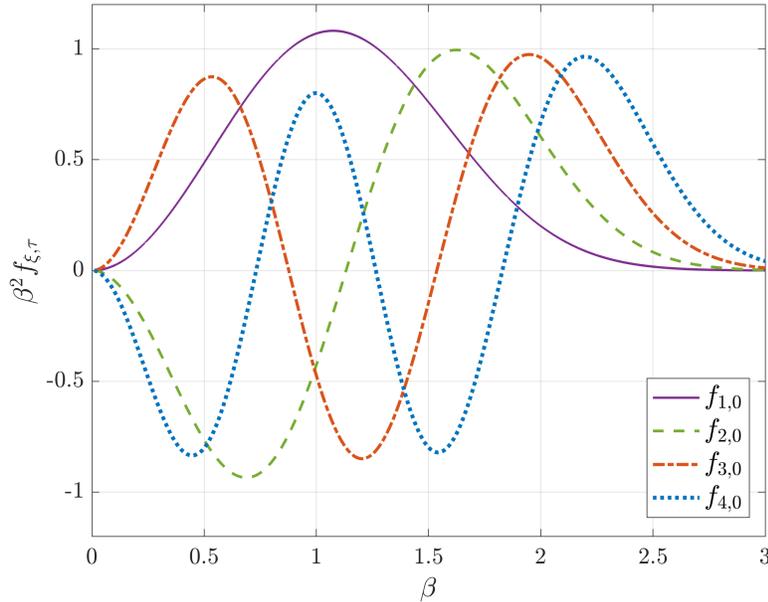


Figura 2.12: Funciones de onda $f_{\xi,\tau}$, solución de la ecuación (2.41), para $\xi = 1, \dots, 4$ y $\tau = 0$.

2.3. Extremos de la transición de fase

A lo largo de este capítulo hemos descrito, desde varios enfoques teóricos, la transición de fase que se da entre un núcleo esférico y uno deformado, γ -inestable. Con el objetivo de hacernos una idea de cómo se encuadra este punto crítico entre los extremos de la transición, vamos a presentar en esta sección los resultados, en el modelo de Bohr-Mottelson, elementales para ambos límites, mediante modelos de oscilador armónico. Estos resultados fueron desarrollados en [13] y aparecen recopilados en [14].

2.3.1. Límite de núcleo esférico

Como ya hemos comentado en varias ocasiones, en el formalismo de Bohr-Mottelson identificamos un núcleo esférico con aquel descrito por un potencial que tenga su mínimo absoluto en $\beta = 0$ (en este caso, introducir una dependencia en γ no cambiaría el carácter esférico, de acuerdo a la descripción de la superficie del núcleo presentada en la ecuación (1.9)).

En este caso, vamos a presentar el modelo más sencillo para un potencial de estas características: un oscilador armónico. Este potencial tiene la forma $u(\beta) = k\beta^2/2$, de modo que la ecuación a resolver será:

$$\varphi'' + \frac{1}{\beta}\varphi' + \left[\varepsilon - \frac{1}{2}k\beta^2 - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2} \right] \varphi = 0, \quad \varphi(0) = \varphi(\infty) = 0. \quad (2.42)$$

Este problema diferencial tiene soluciones exactas, presentadas en [14]. Aquí nos limitamos a incluir los resultados referentes al espectro, que nos sirvan para comparar en términos de observables físicos esta situación con otras descritas anterior y posteriormente.

Al igual que en los potenciales antes comentados, las soluciones en β vienen etiquetadas por dos números

cuánticos (n, τ) . Las energías del sistema tienen la forma:

$$E_{n,\tau} = \left(N_{n,\tau} + \frac{5}{2} \right) \hbar\omega = \left(2n + \tau + \frac{5}{2} \right) \hbar\omega, \quad N_{n,\tau} = 0, 1, \dots \quad (2.43)$$

En la ecuación anterior, hemos definido la frecuencia de vibración como $\omega = \sqrt{k/B_2}$, donde B_2 es el parámetro de masa que introdujimos en la ecuación (1.11).

Notemos que, en este caso, dado que $N = 2n + \tau = 0, 1, \dots$, el número cuántico n toma valores en $n = 0, 1, \dots$. Con el objetivo de hacer más clara la comparación con los casos antes estudiados, introducimos el número cuántico $\xi = n + 1 = 1, 2, \dots$; con él, el espectro toma la forma:

$$E_{\xi,\tau} = \left(2\xi + \tau + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega, \quad \xi = 1, 2, \dots; \tau = 0, 1, \dots \quad (2.44)$$

Como ya hemos hecho antes, podemos eliminar la dependencia de los parámetros introduciendo las energías reducidas o de excitación:

$$e_{\xi,\tau} = \frac{E_{\xi,\tau} - E_{1,0}}{E_{1,1} - E_{1,0}} = 2(\xi - 1) + \tau. \quad (2.45)$$

Así, obtenemos unos resultados de cocientes de energías como los que podemos ver en la tercera fila de la Tabla 2.7. Como podemos observar, los valores de cocientes de energías en el límite esférico sirven como cota inferior a los obtenidos en ambos modelos del punto crítico.

2.3.2. Límite de núcleo deformado γ -inestable

Análogamente a lo presentado en la sección anterior, buscamos resolver un potencial $u(\beta)$ que modele un núcleo deformado, γ -inestable, es decir, un potencial independiente de γ y cuyo mínimo se encuentre en un valor $\beta > 0$. La propuesta realizada en [13] es de modelar esta situación mediante un oscilador armónico desplazado, $u(\beta) = k(\beta - \beta_0)^2/2$.

Mediante los cambios de variable $x = \sqrt{B_2\omega/(\hbar\beta)}$, $\zeta = x^2 f$, podemos llegar a que la ecuación a resolver es:

$$-\frac{1}{2}\zeta'' + \frac{1}{2} \left[(x - x_0)^2 + \frac{(\tau + 1)(\tau + 2)}{x^2} \right] \zeta = \varepsilon\zeta \quad (2.46)$$

Para obtener los autovalores de la ecuación anterior, consideramos el término de potencial efectivo y lo desarrollamos en serie alrededor de su mínimo, \tilde{x}_τ :

$$v_\tau(x) = \frac{1}{2} \left[(x - x_0)^2 + \frac{(\tau + 1)(\tau + 2)}{x^2} \right] \cong v_\tau(\tilde{x}_\tau) + \frac{\omega_\tau^2}{2} (x - \tilde{x}_\tau)^2, \quad \omega_\tau = \left. \frac{d^2 v_\tau}{dx^2} \right|_{x=\tilde{x}_\tau}. \quad (2.47)$$

En esta aproximación, tendremos una ecuación de oscilador armónico monodimensional desplazado, con la frecuencia angular, ω_τ , y el origen, \tilde{x}_τ , dependientes del número cuántico τ . Así, las energías tendrán la forma:

$$E_{\xi,\tau} = \left(\xi - \frac{1}{2} \right) \omega_\tau + v_\tau(\tilde{x}_\tau), \quad \xi = 1, 2, \dots \quad (2.48)$$

Merece la pena comentar que los errores cometidos en la estimación de la energía con esta aproximación son siempre menores del 4%.

Dado que $x \sim \beta^{-1/2}$, deberíamos usar valores altos de x_0 a la hora de resolver la ecuación anterior, ya que la deformación β no puede tomar valores elevados. En la Tabla 2.7, se incluyen los resultados para un valor de $x_0 = 10$, con el que los resultados numéricos empiezan a estabilizarse.

	$E_{4_{1,2}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{2,0}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{1,3}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{2,0}}/E_{0_{1,3}}$
$E(5)$	2.20	3.03	3.59	0.84
β^4	2.09	2.39	3.27	0.73
Esférico	2.00	2.00	3.00	0.67
Deformado	2.49	49.3	4.49	10.98

Tabla 2.7: Algunos ratios de energías relevantes en la simetría $E(5)$, el potencial β^4 y los límites de núcleo esférico y deformado, γ -inestable.

Notemos que los cocientes que involucran al estado $0_{2,0}^+$ toman valores mucho mayores que los otros; esto se debe a que, en este modelo de potencial, la primera banda vibracional (con $\xi = 2$) tiende a subir en energía, mientras que el primer estado excitado, $2_{1,1}^+$, se acerca al fundamental.

Como podemos notar en la Tabla 2.7, los valores de energías obtenidos en los modelos del punto crítico se encuentran entre los obtenidos en los límites esférico y deformado, γ -inestable.

Capítulo 3

La cadena isotópica del Ru

En la Sección 1.3, introdujimos los fundamentos del modelo de bosones en interacción, o IBM, desde un punto de vista completamente teórico. En este capítulo, nos dedicaremos a aplicar estos conceptos para realizar cálculos de estructura sobre los isótopos del rutenio. Dado que el IBM precisa de que el núcleo sea par-par, estudiaremos los núcleos ^{96}Ru , ^{98}Ru , \dots , ^{110}Ru .

Según comentamos en las características del modelo, tratamos pares de nucleones cerca del límite de las capas como bosones. Dado que el rutenio tiene número atómico $Z = 44$, y el quinto número mágico es 50, consideramos $N_\pi = 3$ bosones provenientes de “huecos” de protones. Además, el ^{96}Ru tiene $A - Z = 52$ neutrones, luego hay 2 neutrones en la última capa, así que consideraríamos que tiene $N_\nu = 1$ y, en global, lo identificaríamos en el IBM como un núcleo con $N = N_\pi + N_\nu = 4$ bosones. De forma análoga, podemos ver que toda la cadena que consideramos se corresponde con núcleos con $N = 4, 5, \dots, 11$ bosones.

A lo largo de esta sección, usaremos los datos de energías para los isótopos del Ru procedentes de [15]; además, los ratios de transición para el ^{104}Ru provienen de [16].

3.1. Cálculos de energías en el IBM

En esta sección, vamos a realizar cálculos sobre los niveles energéticos de los isótopos de rutenio, y a compararlos con los resultados experimentales disponibles.

Para empezar, debemos recordar que en la Sección 1.3 vimos varias formas de expresar el hamiltoniano del IBM. Para hacer estos cálculos, vamos a usar el operador en su forma multipolar:

$$H = \varepsilon_d \hat{n}_d + \kappa_0 (\hat{\mathcal{P}}^\dagger \cdot \hat{\mathcal{P}}) + \kappa_1 (\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}}) + \kappa_2 (\hat{\mathcal{Q}}^\chi \cdot \hat{\mathcal{Q}}^\chi) + \kappa_3 (\hat{\mathcal{T}}_3 \cdot \hat{\mathcal{T}}_3) + \kappa_4 (\hat{\mathcal{T}}_4 \cdot \hat{\mathcal{T}}_4) - \frac{\kappa_0}{4} N(N+4), \quad (3.1)$$

es decir, el hamiltoniano de la ecuación (1.33), fijando el origen de energías en $E'_0(N) = \kappa_0 N(N+4)/4$.

Para calcular los parámetros $\{\varepsilon_d, \kappa_\mu\}$, hacemos un procedimiento de ajuste por χ^2 a los datos experimentales de los isótopos a considerar. Así, en [17], se obtienen los valores que exponemos en la Tabla 3.1. En ella, podemos notar que $\kappa_2 = \kappa_4 = 0$; esto se debe a que esta cadena se corresponde con la clase transicional $U(5) - O(6)$ (en términos geométricos, la transición del caso esférico al deformado, γ -inestable). Además, vemos que el único parámetro que cambia a lo largo de la cadena es ε_d , mientras que el resto se mantienen constantes.

Con estos parámetros, podemos ahora obtener los niveles energéticos y las transiciones electromagnéticas de los isótopos del rutenio, para lo que hemos usado el código desarrollado por P. Van Isacker [18]. Dado que una de las hipótesis del modelo es que sólo trabajamos en los entornos de las capas cerradas, sólo podemos esperar que se reflejen correctamente los estados con energías relativamente pequeñas, que no involucren en exceso a las capas cerradas.

ε_d	κ_0	κ_1	κ_2	κ_3	κ_4
$887 - 53N$	93.2	11.66	0	61.6	0

Tabla 3.1: *Parámetros del hamiltoniano (3.1) para la cadena isotópica del rutenio. Todos los parámetros tienen unidades de keV.*

En la Figura 3.1, representamos los niveles de energía obtenidos con el IBM, tomando el origen en el estado fundamental, 0_1^+ , y comparamos con los datos experimentales disponibles. Es importante comentar que, dado que en el IBM no aparecen de forma natural las bandas vibracionales que considerábamos antes, ya no podemos directamente notar los estados como $J_{\xi,\tau}^\pi$; por tanto, simplemente se notan con J_n^π , siendo n el índice del estado entre los que tienen momento angular J ($n = 1$ si es el estado de menor energía con espín J , $n = 2$ si es el primer excitado, etcétera).

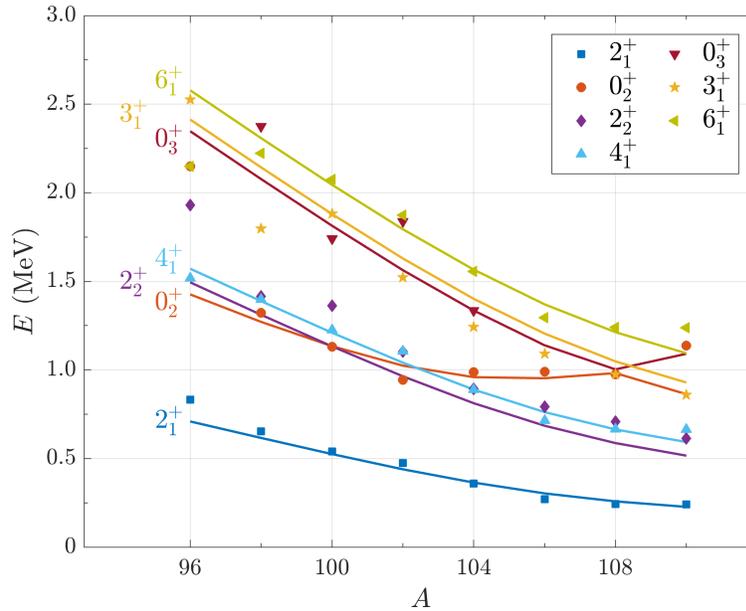


Figura 3.1: *Representación de los cálculos en el IBM de los primeros estados excitados en los isótopos del Ru (en líneas continuas) y los datos experimentales (puntos).*

Como podemos observar en la Figura 3.1, el ajuste con el IBM es especialmente bueno en los primeros estados excitados, mientras que hay una dispersión considerablemente mayor para los estados 0_3^+ y 3_1^+ . El mal ajuste a estos estados no es aislado de este análisis, sino que se ha identificado en otros estudios.

Como hemos comentado en secciones previas, uno de los observables más característicos en los núcleos par-par es el cociente de las energías del segundo y primer estado excitado, o ratio 4/2. En la Figura

3.2, incluimos una representación de estos ratios calculados en el IBM, comparando con los resultados en el modelo de Bohr. En esta figura, podemos ver no sólo el punto crítico $E(5)$ y los límites esférico y γ -inestable que calculamos en la Sección 2, sino que también hemos representado el límite de rotor rígido, en el que las energías toman el valor:

$$E_L = \mathcal{I}\hbar^2 L(L+1) \Rightarrow e_L = \frac{E_L - E_0}{E_2 - E_0} = \frac{L(L+1)}{6}, \quad (3.2)$$

siendo \mathcal{I} el momento de inercia del núcleo y L el momento angular. Esta situación, en la que el núcleo rota entorno a un eje de deformación, corresponde a un núcleo prolado u oblado. Éste es un límite que no hemos tratado en este trabajo, pero lo hemos incluido en la Figura 3.2 porque, como podemos ver, los núcleos con $A \geq 106$ se alejan ligeramente de las predicciones del límite γ -inestable, pero quedan aún lejos del valor de $E(4^+)/E(2^+) = 10/3$ característico de los núcleos oblatos o prolados. Por tanto, podemos concluir que se comportan como núcleos deformados, γ -inestables.

Un hecho importante a notar en la Figura 3.2, y en las que seguirán a continuación, es que en el modelo colectivo no tenemos ninguna dependencia con el número atómico del núcleo a considerar, con lo que sus predicciones son constantes a lo largo de la cadena. Según vemos en esta representación, los cálculos en el IBM quedan por encima de las predicciones para el núcleo esférico y el punto crítico $E(5)$. También es relevante que los núcleos mejor ajustados son los de $A = 100, 102, 104$.

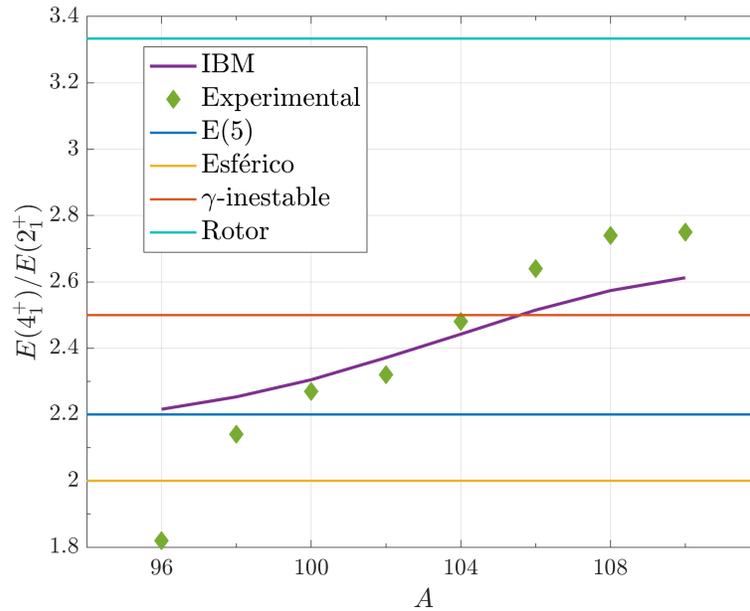


Figura 3.2: Representación de los ratios de las energías de los primeros estados excitados con espín 4^+ y 2^+ en la cadena del Ru, comparando con resultados del modelo de Bohr.

De forma análoga, podemos representar el resto de ratios de energías relevantes, que son los expuestos en la Tabla 2.3. Estas representaciones aparecen en las Figuras 3.3, 3.5 y 3.4. Como podemos ver en la figuras presentadas, no hemos incluido las barras de error en los datos experimentales. Esto se debe a que estas incertidumbres son mucho menores que las escalas de energías en las que trabajamos y no son visibles en la gráfica. Merece la pena aclarar que, en las Figuras 3.3, 3.4 y 3.5, no hemos incluido los resultados del límite γ -inestable en el modelo de Bohr, pues estos son muy altos, como vimos en la

Tabla 2.7 y dificultaría la interpretación de la gráfica. Análogamente, tampoco incluimos el límite de rotor rígido, pues en él no existen estados excitados con repetición de momento angular ni bandas, así que no podemos trabajar con los estados 0_2^+ , 0_3^+ .

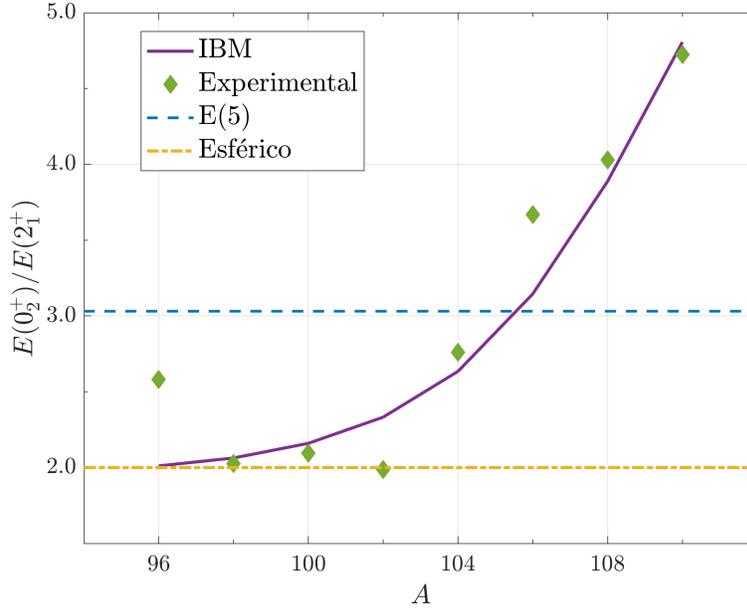


Figura 3.3: Representación de los ratios de las energías de los primeros estados excitados con espín 0^+ y 2^+ en la cadena del Ru, comparando con resultados del modelo de Bohr.

Por último, vamos a tratar con otro observable experimental de especial relevancia, la energía de separación. En la teoría general de Física Nuclear, se define la energía de separación de dos neutrones, S_{2n} , a partir de las energías de ligadura:

$$S_{2n}(Z, A) = B(Z, A) - B(Z, A - 2). \quad (3.3)$$

En el caso del IBM, donde caracterizamos a los núcleos por el número de bosones, tenemos que “quitar” dos neutrones es equivalente a eliminar un bosón:

$$S_{2n}(N) = B_{IBM}(N) - B_{IBM}(N - 1). \quad (3.4)$$

Aquí aparece un problema a la hora de calcular las energías de ligadura. Como comentamos en la introducción teórica al modelo, en el IBM consideramos tan solo los nucleones en el entorno de las capas cerradas (es decir, es un modelo local). Sin embargo, la energía de ligadura es una propiedad global, que debe tener en consideración también lo que sucede en las capas completas. Por ello, según lo propuesto en [19], desde un punto de vista formal, la energía de ligadura en el IBM tendrá la forma:

$$B_{IBM}(N) = B_0(N) + \mathcal{B}_{gl}(N), \quad (3.5)$$

donde $B_0(N) = -E_0(N)$, siendo $E_0(N)$ la energía calculada para el estado fundamental en el modelo, y \mathcal{B}_{gl} es una energía de ligadura “global”, que depende de la posición en la capa y de la propia capa.

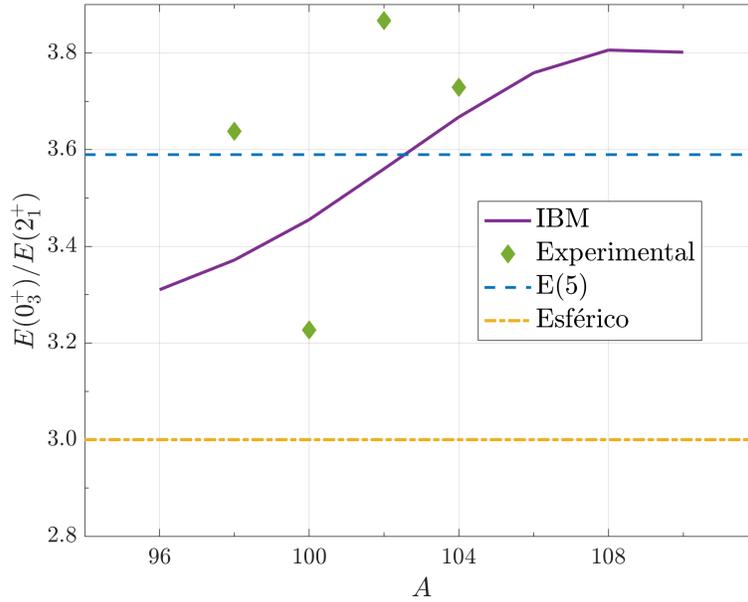


Figura 3.4: Representación de los ratios de las energías del segundo estado excitado con espín 0^+ y el primer 2^+ en la cadena del Ru, comparando con resultados del modelo de Bohr.

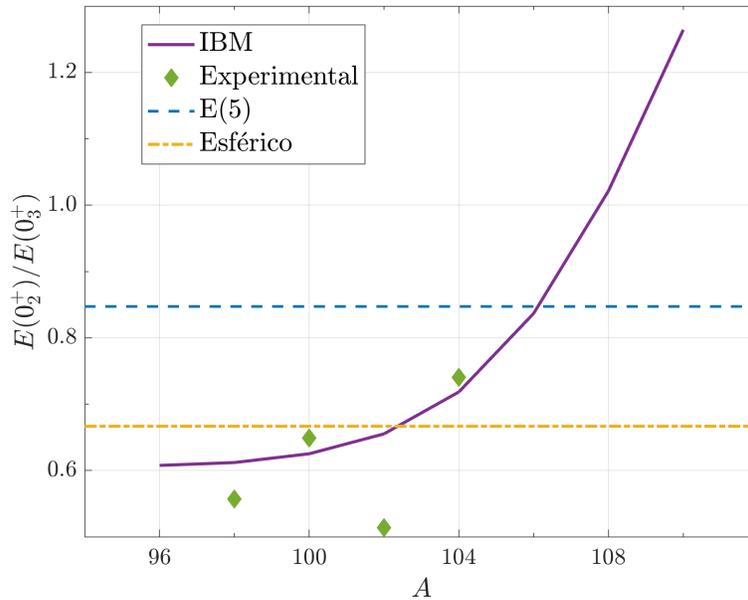


Figura 3.5: Representación de los ratios de las energías de los dos primeros estados excitados con espín 0^+ en la cadena del Ru, comparando con resultados del modelo de Bohr.

El parámetro \mathcal{B}_{gl} lo podríamos calcular usando argumentos basados en el modelo de capas; sin embargo, por comodidad, vamos a usar un procedimiento alternativo para obtener los valores de S_{2n} , sin tener que pasar por el cálculo completo de \mathcal{B}_{gl} . Para proceder, vamos a considerar que \mathcal{B}_{gl} es una

función cuadrática del número de bosones, de la forma:

$$\mathcal{B}_{gl}(N) = a + bN + cN(N - 1). \quad (3.6)$$

Entonces, la diferencia entre la energía de ligadura global para dos isótopos consecutivos, que podemos notar como una “energía de separación global”, $\mathcal{S}_{2n,gl}$, es una función lineal de N :

$$\mathcal{S}_{2n,gl} = \mathcal{B}_{gl}(N) - \mathcal{B}_{gl}(N - 1) = b + 2c(N - 1) \equiv p + qN. \quad (3.7)$$

Entonces, la energía de separación en el marco del IBM será:

$$\mathcal{S}_{2n,IBM}(N) = B_0(N) - B_0(N - 1) + \mathcal{S}_{2n,gl}(N). \quad (3.8)$$

Llegados a este punto, reordenando la ecuación anterior, está claro que podemos hacer una buena estimación de $\mathcal{S}_{2n,gl}$ haciendo un ajuste de mínimos cuadrados, usando las energías de separación experimentales:

$$\mathcal{S}_{2n,exp} - [B_0(N) - B_0(N - 1)] \approx \mathcal{S}_{2n,gl}(N) = p + qN \quad (3.9)$$

Siguiendo este procedimiento, hemos calculado las energías de separación de dos neutrones que se presentan en la Figura 3.6.

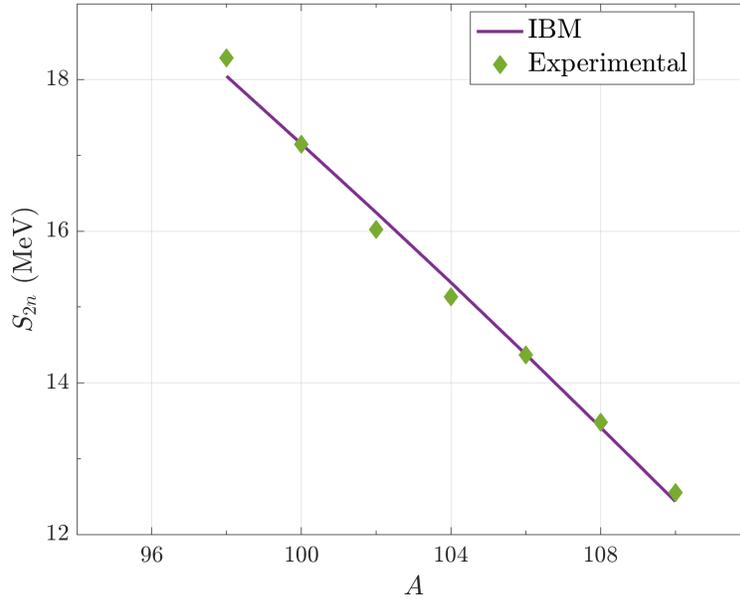


Figura 3.6: Representación de separación de dos neutrones en la cadena del Ru.

Como hemos comentado anteriormente, en el modelo colectivo no hay ninguna dependencia del número de nucleones, lo que en particular implica que no se puede calcular las energías de separación, motivo por el que, en la Figura 3.6, sólo se incluyen los resultados experimentales y los cálculos en el IBM.

3.2. Búsqueda del punto crítico

En la sección anterior, hemos presentado los parámetros usados en el hamiltoniano (1.33) para hacer cálculos en el IBM. Sin embargo, estos parámetros también se pueden usar en la expresión de la energía

en el formalismo de estados coherentes, presentada en la ecuación (1.69).

Viendo la expresión (1.69), podemos notar que, al ser $\kappa_2 = 0$ en nuestro ajuste, la superficie de energía es independiente de γ (lo que va acorde con la idea de que en la cadena con la que trabajamos se da la transición $U(5) - O(6)$). Por ello, podemos representar la energía $E(N; \beta)$ como curvas en β para cada N , que es lo que exponemos en la Figura 3.7, en la que también incluimos una indicación del mínimo de energía en cada curva, y la tendencia que tienen esos mínimos.

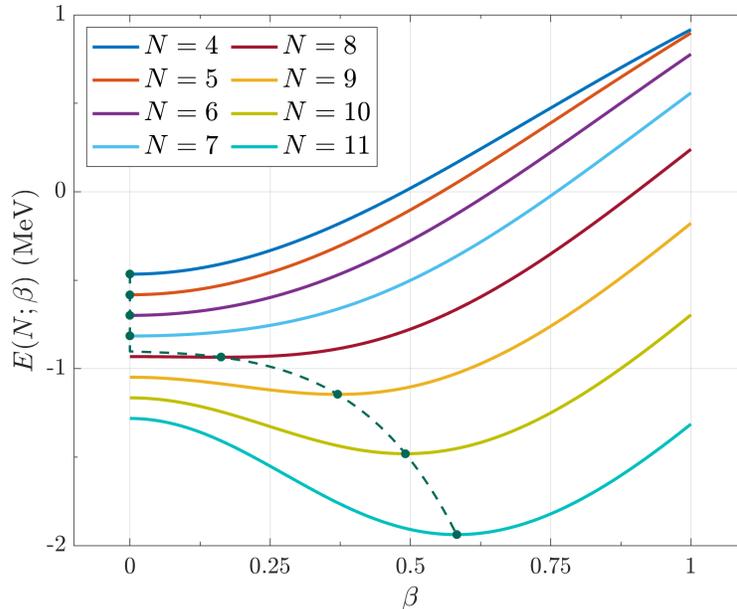


Figura 3.7: Representación de las curvas de energía en el formalismo de estados coherentes, $E(\beta)$, para cada uno de los isótopos considerados del Ru, incluyendo el mínimo de energía. Debido al término $-\kappa_0 N(N+4)/4$ del hamiltoniano, las curvas aparecen de forma que, a mayor ordenada en el origen, menor número de bosones N .

Como podemos observar en la Figura 3.7, los isótopos con $N = 4, \dots, 7$ tienen el mínimo en $\beta = 0$, lo que es señal de que son núcleos esféricos. Para $N \geq 9$, las curvas presentan claramente mínimos absolutos en $\beta > 0$, con lo que tenemos núcleos deformados, γ -inestables. Sin embargo, el isótopo con $N = 8$, que se corresponde con el ^{104}Ru , se encuentra en la transición entre ambos, presentando una curva apreciablemente plana en un gran intervalo de valores de β . Para recalcar esta idea, presentamos en la Figura 3.8 un detalle de las curvas de energía para $N = 7, 8, 9$, incluyendo una curva con dependencia β^4 , que, como demostramos en la Sección 2.2.1, es la forma que tiene el potencial en el punto crítico en el formalismo de estados coherentes.

Este análisis nos permite sospechar que el ^{104}Ru es el candidato en esta cadena de isótopos a presentar el punto crítico. Además, podemos confirmar esta predicción numéricamente, usando la teoría de Landau presentada en la Sección 1.4. La curva de energía de este sistema tiene la siguiente forma:

$$E(N; \beta) = \frac{N\beta^2}{1 + \beta^2} \left(\varepsilon_d(N) + 6\kappa_1 + \frac{7}{5}\kappa_3 \right) + N(N-1) \frac{\kappa_0}{4} \left(\frac{1 - \beta^2}{1 + \beta^2} \right)^2, \quad (3.10)$$

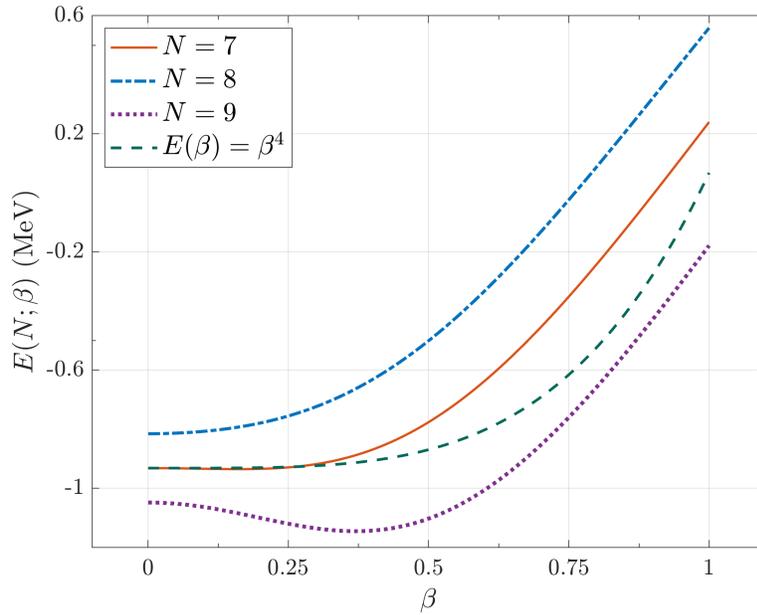


Figura 3.8: Representación de las curvas de energía en el formalismo de estados coherentes, $E(\beta)$, para $N = 7, 8, 9$, incluyendo una curva teórica $E(\beta) = \beta^4$.

donde hemos indicado explícitamente que $\varepsilon_d = a + bN$ tiene una dependencia en N , mientras que el resto de parámetros del ajuste son constantes. La condición de Landau para las transiciones de fase de segundo orden es:

$$\left. \frac{\partial^2 E}{\partial \beta^2} \right|_{\beta=0, N=N_c} = \left[-2\alpha_1(N_c) \frac{3\beta^2 - 1}{(1 + \beta^2)^3} - 8\alpha_2(N_c) \frac{3\beta^4 - 8\beta^2 + 1}{(1 + \beta^2)^4} \right]_{\beta=0} = 0. \quad (3.11)$$

En la ecuación anterior, hemos definido por comodidad los parámetros:

$$\alpha_1(N) = N \left(\varepsilon_d(N) + 6\kappa_1 + \frac{7}{5}\kappa_3 \right), \quad \alpha_2(N) = N(N - 1) \frac{\kappa_0}{4}. \quad (3.12)$$

Aplicando la condición de la ecuación (3.11):

$$2\alpha_1(N_c) - 8\alpha_2(N_c) = 0 \Rightarrow N_c = \frac{a + \kappa_0 + 6\kappa_1 + 7\kappa_3/5}{\kappa_0 - b}, \quad (3.13)$$

que, resolviendo para los valores numéricos de la Tabla 3.1, proporciona:

$$N_c = 7,7729 \cong 8. \quad (3.14)$$

Por tanto, este resultado nos confirma lo que habíamos predicho con la inspección de la Figura 3.7: el punto crítico en la cadena de isótopos del rutenio se debe dar en el ^{104}Ru . Por supuesto, aquí se presenta el problema que ya discutimos cuando tratamos las transiciones de fase en sistemas cuánticos: la condición del punto crítico se alcanza en un valor del parámetro de control que no tiene sentido físico, y solo podemos asignarlo a la aproximación más sensata. Sin embargo, pese a esta complicación, afirmaremos a partir de ahora que el ^{104}Ru es nuestro candidato a ser el punto crítico.

3.3. Cálculos de transiciones electromagnéticas en el IBM

En esta sección, vamos a presentar algunos resultados de transiciones electromagnéticas. Al igual que hemos hecho en el formalismo de Bohr-Mottelson, nos vamos a centrar en las transiciones cuadrupolares eléctricas, $E2$.

Como ya vimos en la introducción, las componentes del operador cuadrupolar eléctrico en el IBM vienen dadas por:

$$T_{\mu}^{(E2)} = q\hat{Q}_{\mu}^{\chi} = q \left([d^{\dagger} \times \hat{s} + s^{\dagger} \times \hat{d}]_{\mu}^{(2)} + \chi [d^{\dagger} \times \hat{d}]_{\mu}^{(2)} \right). \quad (3.15)$$

En la ecuación anterior, el parámetro q es, a priori, libre y representa la carga efectiva que tienen los bosones considerados en el modelo.

Para hacer los cálculos y dado que ya hemos visto que el núcleo que más nos interesa es el ^{104}Ru , fijaremos el valor de q de forma que se reproduzca la transición $2_1^+ \rightarrow 0_1^+$ de este núcleo:

$$B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)_{exp} = 0,168 \text{ e}^2\text{b}^2 \Rightarrow q = 0,105 \text{ e}. \quad (3.16)$$

Dado que el ajuste presentado no nos da información sobre el parámetro χ , lo fijamos arbitrariamente a $\chi = 1$.

Fijados estos parámetros, podemos ver en la Figura 3.9 los valores calculados en el IBM de la transición $B(E2; 4_1^+ \rightarrow 2_1^+)$ en unidades de la transición $B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$, incluyendo la correspondiente comparación con el valor obtenido en el $E(5)$ y los resultados experimentales.

Como podemos notar en la Figura 3.9, al igual que pasaba con los cálculos de energías (Figura 3.2), los núcleos en lo que mejor se predicen los resultados experimentales son los de $A = 100, 102, 104$. Análogamente, en la Figura 3.10 mostramos los ratios de las transiciones $B(E2; 0_2^+ \rightarrow 2_1^+)$, de nuevo en unidades de $B(E2; 4_1^+ \rightarrow 2_1^+)$.

Dada la falta de resultados experimentales, no incluimos más comparaciones de ratios de transición para la cadena de isótopos. Sin embargo, en la siguiente sección, haremos un estudio en profundidad del ^{104}Ru , y mostraremos más resultados de sus transiciones cuadrupolares eléctricas.

3.4. Comparación de resultados en el punto crítico

A lo largo de esta sección, hemos hecho un análisis de la cadena de isótopos del Ru, entendiéndola como un ejemplo de transición entre los límites $U(5)$ (núcleo esférico) y $O(6)$ (deformado, γ -inestable). En el proceso, hemos reconocido el núcleo ^{104}Ru como candidato a ser aquel en el que se da la transición de fase entre ambos, lo que hemos llamado $E(5)$ (en el formalismo de Bohr-Mottelson) o $e(5)$ (en el IBM). En este apartado, vamos a dedicarnos a recopilar todos los resultados obtenidos teóricamente a lo largo del trabajo, para compararlos con los observables medidos experimentalmente para el ^{104}Ru , y valorar más si es, en efecto, el núcleo crítico.

Para empezar, vamos a presentar el espectro calculado para este isótopo en el marco del IBM. Estos resultados están recogidos en las Figuras 3.11 y 3.12.

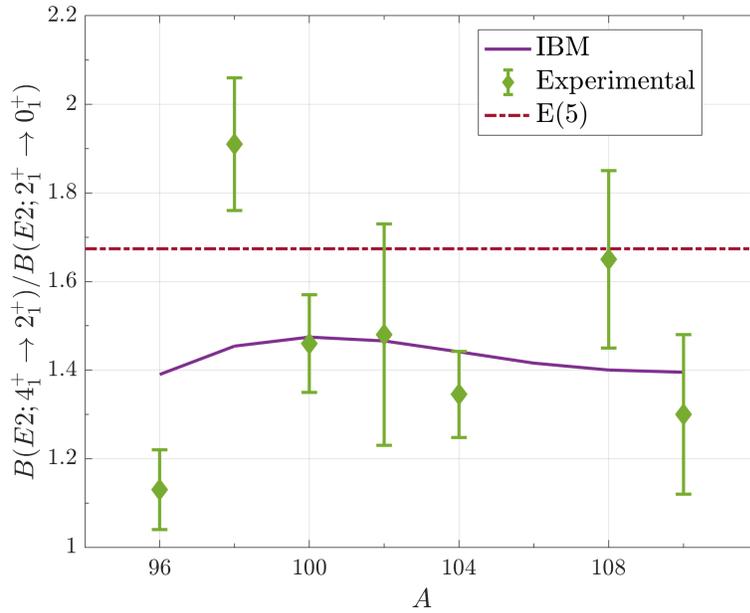


Figura 3.9: Representación de los ratios de transición $B(E2; 4_1^+ \rightarrow 2_1^+) / B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$ a lo largo de la cadena del Ru, mostrando los cálculos del IBM y el resultado en el E(5).

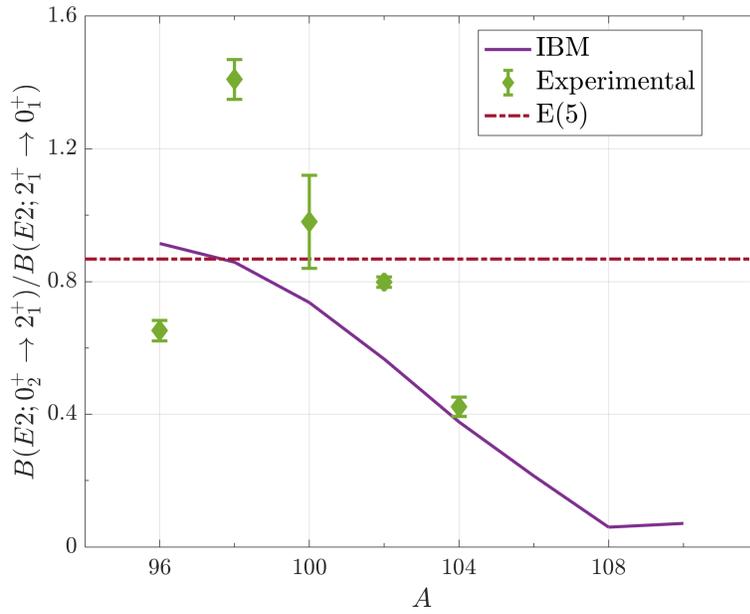


Figura 3.10: Representación de los ratios de transición $B(E2; 0_2^+ \rightarrow 2_1^+) / B(E2; 2_1^+ \rightarrow 0_1^+)$ a lo largo de la cadena del Ru, mostrando los cálculos del IBM y el resultado en el E(5).

Como hemos comentado anteriormente, en los cálculos del IBM no hay una indexación de niveles con unos números cuánticos ξ, τ (aunque sí puedan aparecer como etiquetas en la base), como sí pasaba en los espectros derivados del modelo de Bohr que presentamos en la Sección 2. Sin embargo, podemos construir un espectro análogo a los obtenidos antes, con unas “bandas vibracionales”, usando

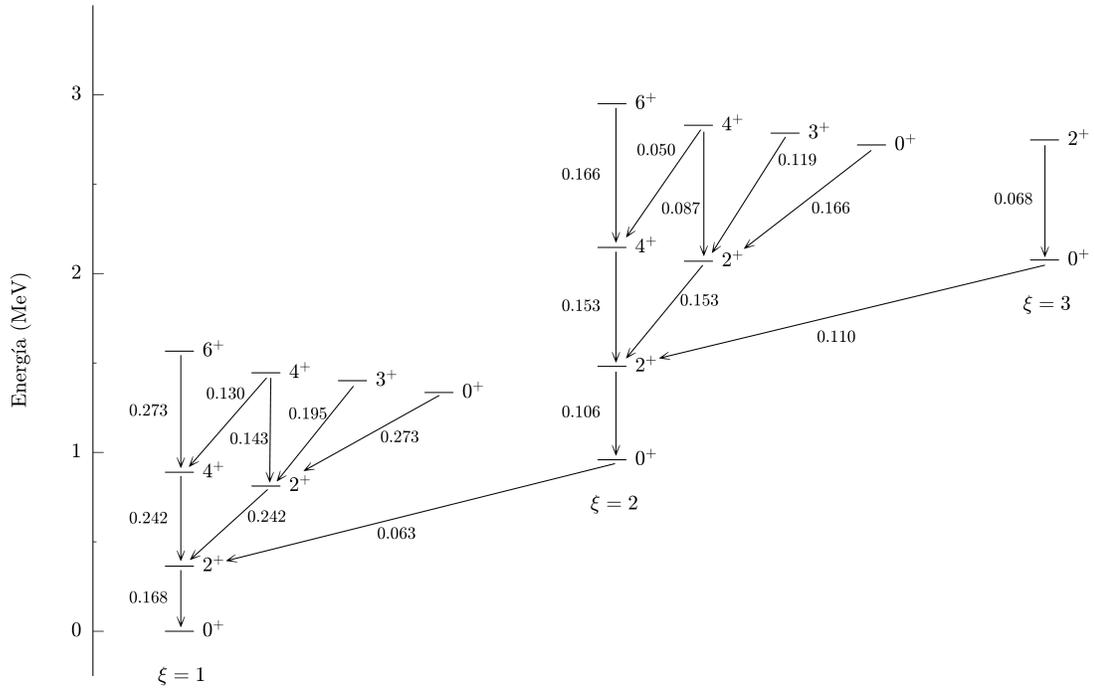


Figura 3.11: Espectro calculado en el IBM para el núcleo ^{104}Ru , usando los parámetros incluidos en la Tabla 3.1. Los números cercanos a las flechas entre estados indican las probabilidades de transición cuadrupolar eléctrica por unidad de tiempo, en unidades de e^2b^2 .

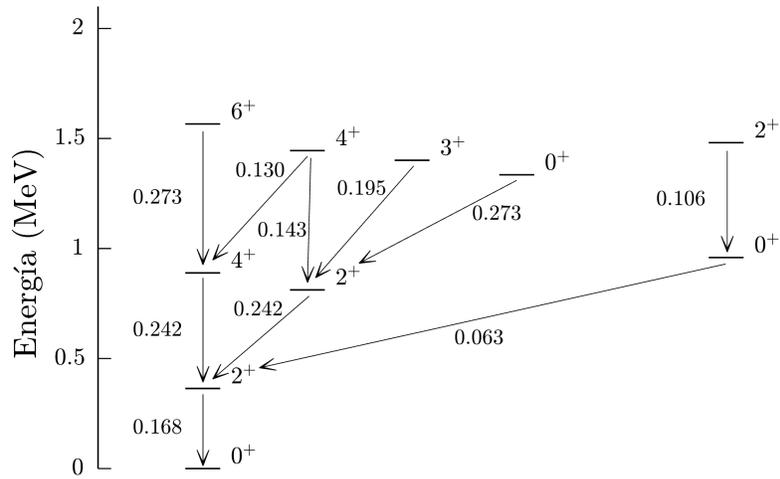


Figura 3.12: Detalle de la Figura 3.11, mostrando los estados de la primera banda y el inicio de la segunda.

las reglas de selección de las transiciones cuadrupolares eléctricas y analizando qué transiciones son posibles dentro de los cálculos hechos con el IBM. Haciendo esto, no solo discernimos las transiciones permitidas entre niveles de forma más sencilla, sino que también tendremos una idea más clara de la naturaleza de cada estado. Notemos que, aunque esta construcción sí le daría sentido a un número cuántico vibracional ξ , el número τ sólo serviría para visualizar las reglas de selección, pero ya no aparece la degeneración que teníamos en los espectros de las Figuras 2.6 o 2.10 para niveles con los mismos ξ, τ pero distinto espín.

A continuación, mostramos en la Tabla 3.2 los cocientes de energías de excitación relevantes en todos los modelos teóricos tratados, incluyendo también los resultados experimentales para el ^{104}Ru . Es interesante notar en ella que los cálculos hechos con el IBM son claramente los más fieles a los resultados experimentales, lo que parece indicar que es el modelo más adecuado para describir este núcleo.

	$E_{4_{1,2}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{2,0}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{1,3}}/E_{2_{1,1}}$	$E_{0_{2,0}}/E_{0_{1,3}}$
$E(5)$	2.20	3.03	3.59	0.84
β^4	2.09	2.39	3.27	0.73
Esférico	2.00	2.00	3.00	0.67
Deformado	2.49	49.3	4.49	10.98
IBM	2.44	2.63	3.67	0.72
^{104}Ru	2.48	2.76	3.73	0.74

Tabla 3.2: *Cocientes de energías relevantes, presentados para los modelos teóricos trabajados y los datos reales del ^{104}Ru .*

Análogamente, en la Tabla 3.3, podemos ver los resultados para los ratios de transición en las simetrías discutidas y en el IBM, comparando con los datos reales del núcleo. Dado que para el $E(5)$ y el potencial β^4 hemos calculado los ratios reducidos (en unidades de la transición $2_{1,1}^+ \rightarrow 0_1^+$, asignándole a ésta el valor 100), hacemos lo propio a la hora de mostrar los datos experimentales y los resultados del IBM.

	$\lambda(4_{1,2} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(0_{2,0} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(2_{1,2} \rightarrow 2_{1,1})$	$\lambda(6_{1,3} \rightarrow 4_{1,2})$
$E(5)$	167	86	167	217
β^4	183	141	183	256
IBM	144	38	144	163
^{104}Ru	135	42	67	190

Tabla 3.3: *Ratios de transición reducidos (en unidades de la transición $2_{1,1} \rightarrow 0_{1,0}$, tomando ésta el valor 100) relevantes en las simetrías estudiadas y el IBM, junto con los datos experimentales del ^{104}Ru .*

Respecto a la Tabla 3.3, es interesante que los resultados derivados con el modelo de Bohr-Mottelson sobreestiman claramente la transición $0_{2,0}^+ \rightarrow 2_{1,1}^+$ y, en menor medida, la $4_{1,2}^+ \rightarrow 2_{1,1}^+$. Además, también resulta que todos los modelos presentados coinciden en que $\lambda(2_{1,2} \rightarrow 2_{1,1}) > 100$ (es decir, la probabilidad por unidad de tiempo de la transición $2_{1,2}^+ \rightarrow 2_{1,1}^+$ es mayor que la de la transición $2_{1,1}^+ \rightarrow 0_{1,0}^+$),

mientras que los datos reales indican lo contrario.

Para completar la comparación, incluimos en la Figura 3.13 el espectro experimental del ^{104}Ru . Además, en las Figuras 3.14, 3.15 y 3.16, comparamos el espectro experimental con los obtenidos con el IBM, el pozo infinito $E(5)$ y el potencial β^4 , respectivamente. Para facilitar más la comparación, en este caso hemos representado los dos últimos tomando los valores experimentales de la energía de excitación del estado $2_{1,1}^+$ y de la transición $2_{1,1}^+ \rightarrow 0_{1,0}^+$, de forma que podemos representar el espectro con magnitudes absolutas, en vez de relativas al primer nivel excitado.

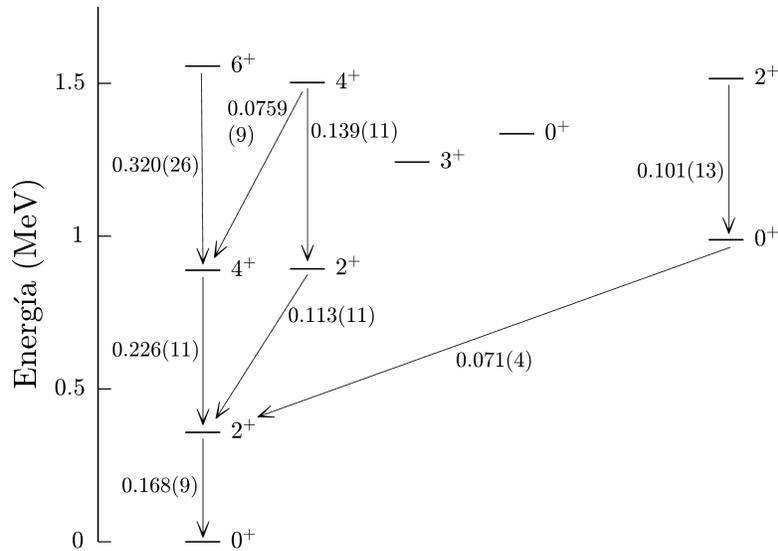


Figura 3.13: *Espectro experimental del núcleo ^{104}Ru . Los números cercanos a las flechas entre estados indican las probabilidades de transición cuadrupolar eléctrica por unidad de tiempo, en unidades de e^2b^2 .*

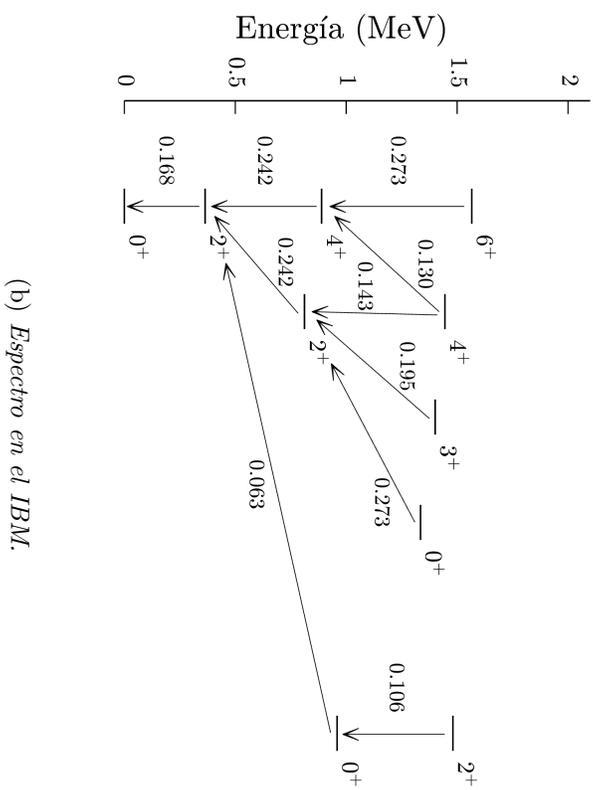
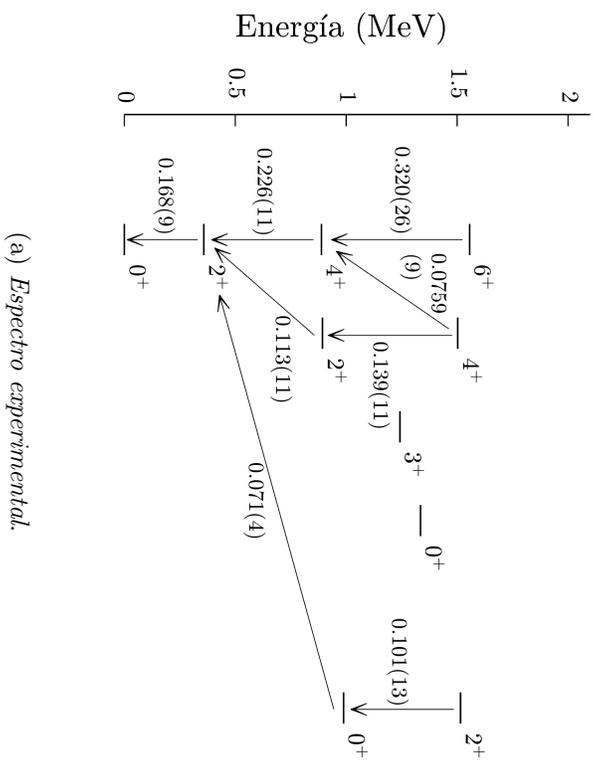
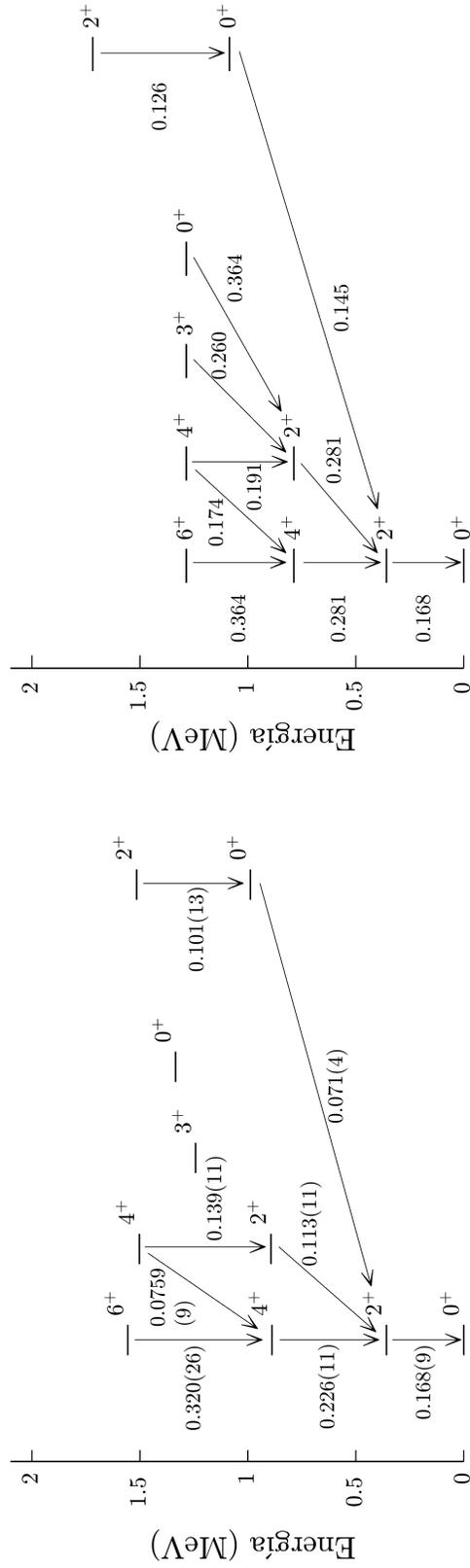


Figura 3.14: Comparación del espectro experimental del núcleo de ^{104}Ru con el calculado en el formalismo del IBM, usando los parámetros de la Tabla 3.1. En ambos casos, las probabilidades de transición cuadrupolar eléctrica están en unidades de e^2b^2 .



(a) Espectro experimental.

(b) Espectro en el punto crítico $E(5)$.

Figura 3.15: Comparación del espectro experimental del núcleo de ^{104}Ru con el calculado en el punto crítico $E(5)$, adaptado a la energía y a la desc excitación del primer estado excitado. En ambos casos, las probabilidades de transición cuadrupolar eléctrica están en unidades de e^2b^2 .

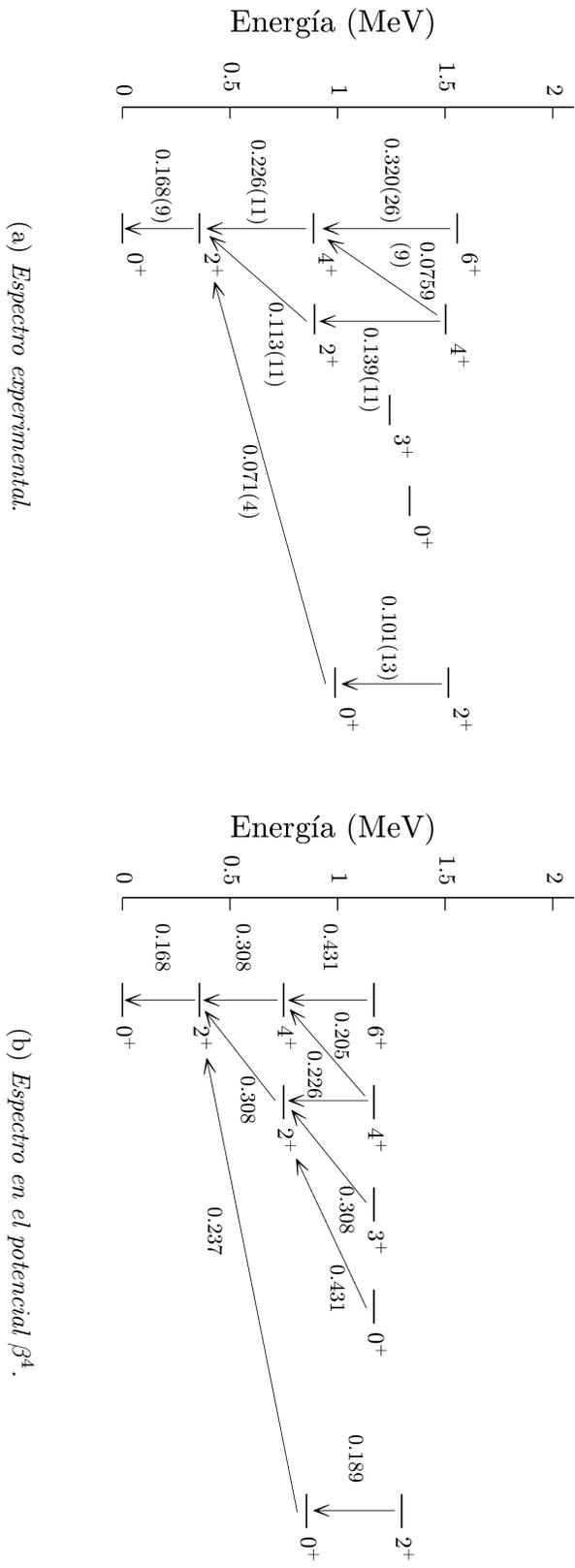


Figura 3.16: Comparación del espectro experimental del núcleo de ^{104}Ru con el calculado para el potencial β^4 en el modelo de Bohr-Mottelson, adaptado a la energía y a la desexcitación del primer estado excitado. En ambos casos, las probabilidades de transición cuadrupolar eléctrica están en unidades de e^2b^2 .

Capítulo 4

Resumen y conclusiones

El contenido de este trabajo se encuadra dentro del marco del estudio de la estructura nuclear. Como ya hemos comentado al principio, el núcleo atómico es un sistema físico enigmático, en el sentido de que no conocemos exactamente la interacción que lo rige y estabiliza, ni sabemos cómo aproximarnos a ella. Además, en la práctica, es inviable tratar de hacer una descripción del núcleo en términos del movimiento de todos y cada uno de los nucleones, debido a la complejidad del sistema. Por lo tanto, hemos tenido que recurrir a ciertos modelos, más o menos precisos, para tratar de justificar los resultados experimentales que observamos en ciertos núcleos.

El primero de los modelos que hemos presentado es el de Bohr-Mottelson, o modelo colectivo. De él, podríamos esperar que fuera impreciso, pues intentar modelar una superficie matemáticamente, en un sistema que no puede escapar de los efectos cuánticos (donde se incluyen las conocidas fluctuaciones e indeterminaciones de la posición), parece una aproximación poco adecuada al problema. Sin embargo, hemos visto que este modelo nos permite reproducir ciertos resultados (en núcleos cuya dinámica venga dominada por efectos colectivos de los nucleones) con buena precisión. Además, no podemos despreciar el hecho de que el modelo de Bohr-Mottelson nos proporciona un análogo clásico, que nos puede permitir entender mejor los efectos que estamos tratando, al reducirlos a deformaciones sobre la superficie de un sólido.

Posteriormente, hemos tratado con el modelo de bosones en interacción, el cual, desde el punto de vista de la reproducción de los resultados para los núcleos analizados, ha sido el más exitoso, aunque, desde el punto de vista de la interpretación de resultados, el ser un modelo algebraico y cuántico lo hace más abstracto que el modelo geométrico. Para solventar esto, hemos introducido el formalismo de estados coherentes, que nos permite hacer una interpretación geométrica de los resultados del IBM tratando el estado fundamental como un condensado bosónico. Es interesante resaltar que este formalismo puede extenderse y generalizarse, por ejemplo, para el estudio de excitaciones vibracionales.

En el marco de la interpretación geométrica, hemos centrado la mayor parte del trabajo en estudiar lo que ocurre cuando pasamos de tener núcleos esféricos, a núcleos con una determinada deformación (la que hemos llamado γ -inestable). En el modelo geométrico, hemos podido analizar esta situación simplemente proponiendo un potencial que interpole razonablemente ambas situaciones. Sin embargo, en el IBM, hemos podido ir más allá, pues hemos demostrado formalmente que este cambio es una transición de fase de segundo orden.

En la última parte del trabajo, hemos tratado de encontrar esa transición de fase en la naturaleza. Para ello, hemos estudiado el comportamiento de varios isótopos del rutenio y, mediante comparación

con los resultados obtenidos teóricamente, hemos concluido que el candidato más probable a ser el “núcleo crítico” es el ^{104}Ru . Cabe destacar que la identificación del ^{104}Ru como punto crítico se ha basado casi exclusivamente en consideraciones energéticas (cálculos de las superficies de energía, estudio de las energías de excitación...). Sin embargo, en la actualidad se está investigando esta predicción mediante el estudio de otros observables físicos, como puede ser la probabilidad de transferencia de 2 neutrones. Esto es una prueba de que el estudio de las transiciones de fase en la forma de los núcleos es un campo de gran interés y actividad en la actualidad.

A lo largo del trabajo, hemos tratado con distintos modelos que, como ya hemos visto, tienen fundamentos muy distintos. Uno de los retos a la hora de trabajar con estos modelos es llevarlos más allá de la teoría y conseguir hacer cálculos con ellos. Por ejemplo, en el punto crítico $E(5)$, los cálculos de los observables que hemos presentado involucran los valores de los ceros de las funciones de Bessel o integraciones numéricas, con lo que hemos tenido que desarrollar códigos en MATLAB que permitieran obtener estos observables. Además, como vimos en la Sección 2.2.2, la resolución del potencial β^4 en el modelo colectivo no es analítica, con lo que también hemos tenido que desarrollar e implementar en MATLAB un esquema numérico para hacer los cálculos que nos interesaban, tanto de los autovalores del problema diferencial como de los observables. Por otra parte, el IBM es un modelo puramente algebraico, y la obtención de resultados numéricos no es directa, con lo que hemos tenido que familiarizarnos con el entorno del programa de Fortran [18] para llevar a cabo los cálculos. Además de esto, introdujimos el formalismo de estados coherentes con el objetivo de simplificar la interpretación de los resultados del IBM. Aquí, tuvimos que reproducir el proceso para llegar, a partir de la definición de los estados coherentes, al cálculo de las superficies de energía, que detallamos en el Apéndice B.

Bibliografía

- [1] A. Bohr. *The coupling of nuclear surface oscillations to the motion of individual nucleons*. Kongelige Danske Videnskabernes Selskab, Matematik-fysiske Meddelelser, 26:14, 1952.
- [2] F. Iachello y A. Arima. *The Interacting Boson Model*. Cambridge University Press, 1987.
- [3] A. Bohr y B. R. Mottelson. *Nuclear Structure*. World Scientific Publishing Company, 1998.
- [4] D. R. Bès. *The γ -dependent part of the wave functions representing γ -unstable surface vibrations*. Nuclear Physics, 10:373, 1959.
- [5] D.M. Brink y G.R. Satchler. *Angular Momentum*, Oxford Library of the Physical Sciences, 1962.
- [6] B.G. Wybourne. *Classical Groups for Physicists, volumen 6*. John Wiley & Sons, 1975.
- [7] J.N. Ginocchio y M.W. Kirson. *An intrinsic state for the interacting boson model and its relationship to the Bohr-Mottelson model*. Nuclear Physics A, 350:31, 1980.
- [8] G. Jaeger. *The Ehrenfest classification of phase transitions: Introduction and evolution*. Archive for History of Exact Sciences, 53:51, 1998.
- [9] L.D. Landau y E.M. Lifshitz. *Statistical Physics*. Elsevier, 1980.
- [10] F. Iachello. *Dynamic symmetries at the critical point*. Physical Review Letters, 85:3580, 2000.
- [11] D. J. Rowe y J. L. Wood. *Fundamentals of Nuclear Models*. World Scientific, 2010.
- [12] J. M. Arias, C. E. Alonso, A. Vitturi, J. E. García-Ramos, J. Dukelsky, y A. Frank. *$U(5)$ - $O(6)$ transition in the interacting boson model and the $E(5)$ critical point symmetry*. Physical Review C - Nuclear Physics, 68:041302(R), 2003.
- [13] L. Wilets y M. Jean. *Surface oscillations in even-even nuclei*. Physical Review, 102:788, 1956.
- [14] L. Fortunato. *Solutions of the Bohr hamiltonian, a compendium..* .The European Physical Journal A, 26:1, 2005.
- [15] Base de datos ENSDF, 28 de abril de 2023. <http://www.nndc.bnl.gov/ensarchivals/>
- [16] J. Srebrny, T. Czosnyka, Ch. Droste, S.G. Rohoziński, L. Próchniak, K. Zajac, K. Pomorski, D. Cline, C.Y. Wu, A. Bäcklin, L. Hasselgren, R.M. Diamond, D. Habs, H.J. Körner, F.S. Stephens, C. Baktash, y R.P. Kosteki. *Experimental and theoretical investigations of quadrupole collective degrees of freedom in ^{104}Ru* . Nuclear Physics A, 766:25, 2006.
- [17] A. Frank, C. E. Alonso, y J. M. Arias. *Search for $E(5)$ symmetry in nuclei: The Ru isotopes*. Physical Review C, 65:014301, 2001.

- [18] P. Van Isacker, IBM code, comunicación privada.
- [19] R. Fossion. *Nuclear binding energies: Global collective structure and local shell-model correlations*. Nuclear Physics A, 697:703, 2002.

Apéndice A

Fundamentos de teoría cuántica de momento angular

A lo largo de este trabajo, hemos hecho uso repetido del formalismo de los momentos angulares, las propiedades que tienen estos operadores y la forma de tratar con ellos. En este apéndice, vamos a hacer una breve recapitulación de los fundamentos del tratamiento cuántico del momento angular.

De forma general, decimos que un operador vectorial y lineal, $\hat{\mathbf{J}} = (\hat{J}_1, \hat{J}_2, \hat{J}_3)$, es un operador momento angular si sus componentes satisfacen las relaciones de conmutación:

$$[\hat{J}_\alpha, \hat{J}_\beta] = i\hbar\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}\hat{J}_\gamma, \quad (\text{A.1})$$

donde $\varepsilon_{\alpha\beta\gamma}$ es el tensor antisimétrico de Levi-Civita, definido como:

$$\varepsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} +1, & \text{si } (\alpha\beta\gamma) \text{ es una permutación par,} \\ -1, & \text{si } (\alpha\beta\gamma) \text{ es una permutación impar,} \\ 0, & \text{si } (\alpha\beta\gamma) \text{ no es una permutación.} \end{cases} \quad (\text{A.2})$$

Ejemplos típicos de momentos angulares son el momento angular orbital, $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \wedge \hat{\mathbf{p}}$, o el momento angular de espín, $\hat{\mathbf{S}}$.

Una consecuencia importante de la relación de conmutación elemental, (A.1), es que, para $\alpha = 1, 2, 3$, se tiene también la igualdad:

$$[\hat{J}^2, \hat{J}_\alpha] = 0, \quad \hat{J}^2 = \hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{J}} = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2. \quad (\text{A.3})$$

Dado que \hat{J}^2, \hat{J}_3 conmutan, podemos encontrar una base del espacio en el que actúen formada por autoestados comunes a ambos. Dada la linealidad de los operadores, esta base es numerable (puede ser finita o infinita).

Si notamos los elementos de esta base por $|j m\rangle$, tendremos que los autovalores asociados son:

$$\begin{aligned} \hat{J}^2|j m\rangle &= j(j+1)\hbar^2|j m\rangle, \\ \hat{J}_3|j m\rangle &= m\hbar|j m\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Supongamos ahora que tenemos dos momentos angulares, $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$, y una base de autoestados comunes a ambos, $|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle$:

$$\begin{aligned} \hat{J}_i^2|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= j_i(j_i+1)\hbar^2|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \\ (\hat{J}_3)_i|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle &= m_i\hbar|j_1 m_1 j_2 m_2\rangle, \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Consideremos ahora el operador suma, $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$, que es también un momento angular. Con este operador, podemos definir una nueva base, $|(j_1 j_2) JM\rangle$, cumpliendo:

$$\begin{aligned}\hat{J}^2|(j_1 j_2) JM\rangle &= J(J+1)\hbar^2|(j_1 j_2) JM\rangle, \\ \hat{J}_3|(j_1 j_2) JM\rangle &= M\hbar|(j_1 j_2) JM\rangle, \\ \hat{J}_i^2|(j_1 j_2) JM\rangle &= j_i(j_i+1)\hbar^2|(j_1 j_2) JM\rangle, \quad i = 1, 2.\end{aligned}\tag{A.6}$$

Dado que las dos bases consideradas generan el mismo espacio, existe una transformación unitaria de una a otra. Los coeficientes de esta transformación son los conocidos (y tabulados) coeficientes de Clebsch-Gordan, notados por $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle$, de modo que:

$$|(j_1 j_2) JM\rangle = \sum_{m_1, m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | JM\rangle |j_1 m_1 j_2 m_2\rangle.\tag{A.7}$$

Los coeficientes de Clebsch-Gordan son la forma fundamental de suma (o acoplamiento) de momentos angulares en Mecánica Cuántica. Sin embargo, hay otros modos de proceder con el problema de acoplar momentos angulares. El primero que vamos a presentar es el de los símbolos $3j$ de Wigner, que presentan una mayor simetría que los coeficientes de Clebsch-Gordan. Dados dos momentos angulares, $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2$, y su suma, $\hat{\mathbf{J}}$, definimos los símbolos $3j$ como los coeficientes que hacen que la suma de los momentos angulares considerados sea nula:

$$\sum_{m_1, m_2, m_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle = |00\rangle.\tag{A.8}$$

Se puede comprobar que la definición anterior es equivalente a la siguiente relación con los coeficientes de Clebsch-Gordan:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 -m_3\rangle.\tag{A.9}$$

A partir de estos coeficientes $3j$, podemos definir una generalización con la que hemos tratado en este trabajo, los coeficientes $6j$ de Wigner:

$$\begin{aligned}\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{matrix} \right\} &= \sum_{m_1, \dots, m_6} (-)^{\sum_j (j_k - m_k)} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & -m_6 \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{A.10}$$

Estos coeficientes tienen su origen en que, dada la propiedad asociativa, hay dos formas equivalentes de acoplar tres momentos angulares

Apéndice B

Cálculo de las superficies de energía en el IBM

En la Sección 1.3.4, introdujimos el formalismo de estados coherentes, una teoría de campo medio en el IBM en la que consideramos un condensado bosónico de la forma:

$$|N; \beta, \gamma\rangle = \frac{1}{N!} (\Gamma_g^\dagger)^N |0\rangle, \quad \Gamma_g^\dagger = \frac{1}{A} \left[s^\dagger + a_0 d_0^\dagger + a_2 (d_2^\dagger + d_{-2}^\dagger) \right], \quad (\text{B.1})$$

donde hemos definido:

$$A = \sqrt{1 + \beta^2}, \quad a_0 = \beta \cos \gamma, \quad a_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \beta \sin \gamma. \quad (\text{B.2})$$

Las superficies de energía derivadas de estos estados se obtienen de la evaluación del elemento de matriz:

$$E(N; \beta, \gamma) = \langle N; \beta, \gamma | H | N; \beta, \gamma \rangle, \quad (\text{B.3})$$

donde H es el hamiltoniano del IBM, que podemos presentar con la forma de la ecuación (1.33):

$$H = E'_0(N) + \varepsilon_d \hat{n}_d + \kappa_0 (\hat{\mathcal{P}}^\dagger \cdot \hat{\mathcal{P}}) + \kappa_1 (\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}}) + \kappa_2 (\hat{\mathcal{Q}}^x \cdot \hat{\mathcal{Q}}^x) + \kappa_3 (\hat{\mathcal{T}}_3 \cdot \hat{\mathcal{T}}_3) + \kappa_4 (\hat{\mathcal{T}}_4 \cdot \hat{\mathcal{T}}_4). \quad (\text{B.4})$$

En este apéndice, vamos a dar unas pinceladas de los métodos algebraicos para evaluar estos elementos de matriz. Para proceder en los cálculos, vamos a usar la siguiente propiedad de los conmutadores:

$$[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B] + \frac{n(n-1)}{2} B^{n-2} [[A, B], B] + \dots \quad (\text{B.5})$$

En particular, si $[A, B]$ es una constante, conmuta trivialmente con cualquier operador, luego:

$$[A, B^n] = nB^{n-1}[A, B]. \quad (\text{B.6})$$

Usando las relaciones de conmutación de Bose, tenemos:

$$\begin{aligned} [d_0, \Gamma_g^\dagger] &= a_0 \Rightarrow [d_0, (\Gamma_g^\dagger)^N] = d_0 (\Gamma_g^\dagger)^N - (\Gamma_g^\dagger)^N d_0 = \frac{N a_0}{A} (\Gamma_g^\dagger)^{N-1}, \\ [d_{\pm 1}, \Gamma_g^\dagger] &= 0 \Rightarrow [d_{\pm 1}, (\Gamma_g^\dagger)^N] = d_{\pm 1} (\Gamma_g^\dagger)^N - (\Gamma_g^\dagger)^N d_{\pm 1} = 0, \\ [d_{\pm 2}, \Gamma_g^\dagger] &= a_2 \Rightarrow [d_{\pm 2}, (\Gamma_g^\dagger)^N] = d_{\pm 2} (\Gamma_g^\dagger)^N - (\Gamma_g^\dagger)^N d_{\pm 2} = \frac{N a_2}{A} (\Gamma_g^\dagger)^{N-1}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

Primero, vamos a estudiar el elemento \hat{n}_d :

$$\hat{n}_d = (d^\dagger \cdot \tilde{d}) = \sum_{\mu=-2}^{+2} (-)^\mu d_\mu^\dagger \tilde{d}_{-\mu} = \sum_{\mu} d_\mu^\dagger d_\mu, \quad (\text{B.8})$$

de forma que su elemento de matriz diagonal es:

$$\langle \hat{n}_d \rangle = \langle N; \beta, \gamma | \hat{n}_d | N; \beta, \gamma \rangle = \frac{1}{N!} \sum_{\mu} \langle 0 | \Gamma_g^N d_\mu^\dagger d_\mu (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle, \quad (\text{B.9})$$

donde tenemos los siguientes sumandos:

- $\mu = 0$. El elemento del ket es:

$$d_0 (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle = \left\{ (\Gamma_g^\dagger)^N d_0 + [d_0, (\Gamma_g^\dagger)^N] \right\} | 0 \rangle = (\Gamma_g^\dagger)^N \cancel{d_0 | 0 \rangle} + \frac{N a_0}{A} (\Gamma_g^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle. \quad (\text{B.10})$$

Claramente, el elemento del bra de este sumando es el hermítico del ket:

$$\langle 0 | \Gamma_g^N d_\mu^\dagger = \left\{ d_0 (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle \right\}^\dagger = \langle 0 | \frac{N a_0}{A} \Gamma_g^{N-1}. \quad (\text{B.11})$$

Por tanto, el sumando con $\mu = 0$ es:

$$\langle 0 | \Gamma_g^N d_0^\dagger d_0 (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle = \frac{N^2 a_0^2}{A^2} \langle 0 | \Gamma_g^{N-1} (\Gamma_g^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle = \frac{N^2 a_0^2}{A^2} \left\| (\Gamma_g^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle \right\|^2. \quad (\text{B.12})$$

Dado que el estado $|N; \beta, \gamma\rangle$ está normalizado:

$$1 = \left\| \frac{1}{N!} (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle \right\| \Rightarrow \left\| (\Gamma_g^\dagger)^{N-1} | 0 \rangle \right\| = \sqrt{N-1}, \quad (\text{B.13})$$

luego:

$$\langle 0 | \Gamma_g^N d_0^\dagger d_0 (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle = N^2 (N-1)! \frac{a_0^2}{A^2}. \quad (\text{B.14})$$

- $\mu = \pm 1$. En este caso, dado que $[d_{\pm 1}, (\Gamma_g^\dagger)^N] = 0$, tenemos que estos sumandos se anulan trivialmente:

$$d_{\pm 1} (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle = (\Gamma_g^\dagger)^N \cancel{d_{\pm 1} | 0 \rangle} = 0. \quad (\text{B.15})$$

- $\mu = \pm 2$. Procediendo de forma análoga a como lo hicimos para $\mu = 0$, tenemos:

$$\langle 0 | \Gamma_g^N d_{\pm 2}^\dagger d_{\pm 2} (\Gamma_g^\dagger)^N | 0 \rangle = N^2 (N-1)! \frac{a_2^2}{A^2}. \quad (\text{B.16})$$

Por tanto, la ecuación (B.9) es:

$$\langle \hat{n}_d \rangle = \frac{N^2 (N-1)!}{A^2 N!} (a_0^2 + 2a_2^2). \quad (\text{B.17})$$

Sustituyendo los valores definidos en (B.2), tenemos:

$$\langle \hat{n}_d \rangle = \frac{N \beta^2}{1 + \beta^2}. \quad (\text{B.18})$$

Como ejemplo de cálculo de otro de los valores esperados, vamos a mostrar el de $(\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}})$. El operador $\hat{\mathcal{L}}$ tiene por componentes:

$$\hat{\mathcal{L}}_m = \sqrt{10}[d^\dagger \times \tilde{d}_m^{(1)}] = -\sqrt{10} \sum_{\mu} (-)^{\mu-m} \langle 2, \mu, 2, m-\mu | 1, m \rangle d_{\mu}^{\dagger} d_{\mu-m}, \quad (\text{B.19})$$

y su producto escalar es:

$$(\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}}) = \sum_m (-)^m \hat{\mathcal{L}}_m \hat{\mathcal{L}}_{-m} = \hat{\mathcal{L}}_0 \hat{\mathcal{L}}_0 - (\hat{\mathcal{L}}_1 \hat{\mathcal{L}}_{-1} + \hat{\mathcal{L}}_{-1} \hat{\mathcal{L}}_1). \quad (\text{B.20})$$

Estudiemos primero el término $\hat{\mathcal{L}}_0 \hat{\mathcal{L}}_0$:

$$\hat{\mathcal{L}}_0 = -d_1^{\dagger} d_1 + d_{-1}^{\dagger} d_{-1} - 2(d_2^{\dagger} d_2 - d_{-2}^{\dagger} d_{-2}). \quad (\text{B.21})$$

Al igual que antes, los términos que contienen $d_{\pm 1}$ se anularán al calcular su valor esperado, luego:

$$\langle \hat{\mathcal{L}}_0 \hat{\mathcal{L}}_0 \rangle = \frac{4}{N!} \langle 0 | \Gamma_g^N (d_2^{\dagger} d_2 - d_{-2}^{\dagger} d_{-2}) (d_2^{\dagger} d_2 - d_{-2}^{\dagger} d_{-2}) (\Gamma_g^{\dagger})^N | 0 \rangle. \quad (\text{B.22})$$

Analizando el ket de la expresión anterior, y usando las propiedades de los conmutadores como lo hicimos antes:

$$\begin{aligned} (d_2^{\dagger} d_2 - d_{-2}^{\dagger} d_{-2}) (\Gamma_g^{\dagger})^N | 0 \rangle &= d_2^{\dagger} (d_2 (\Gamma_g^{\dagger})^N) | 0 \rangle - d_{-2}^{\dagger} (d_{-2} (\Gamma_g^{\dagger})^N) | 0 \rangle = \\ &= d_2^{\dagger} \frac{N a_2}{A} (\Gamma_g^{\dagger})^{N-1} | 0 \rangle - d_{-2}^{\dagger} \frac{N a_2}{A} (\Gamma_g^{\dagger})^{N-1} | 0 \rangle = \\ &= \frac{N a_2}{A} (d_2^{\dagger} - d_{-2}^{\dagger}) (\Gamma_g^{\dagger})^{N-1} | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.23})$$

Dado que, de nuevo, el bra a considerar es el hermítico conjugado del ket, tenemos:

$$\langle \hat{\mathcal{L}}_0 \hat{\mathcal{L}}_0 \rangle = \frac{4 N a_2^2}{(N-1)! A^2} \langle 0 | \Gamma_g^{N-1} (d_2 - d_{-2}) (d_2^{\dagger} - d_{-2}^{\dagger}) (\Gamma_g^{\dagger})^{N-1} | 0 \rangle. \quad (\text{B.24})$$

Usando los conmutadores elementales, $[d_{\mu}, d_{\nu}^{\dagger}] = \delta_{\mu\nu}$, podemos reexpresar el producto de la ecuación anterior como:

$$(d_2 - d_{-2})(d_2^{\dagger} - d_{-2}^{\dagger}) = 2 + d_2^{\dagger} d_2 + d_{-2}^{\dagger} d_{-2} - d_2^{\dagger} d_{-2} + d_{-2}^{\dagger} d_2. \quad (\text{B.25})$$

Calculando los conmutadores de $[d_{\mu}^{\dagger} d_{\nu}, (\Gamma_g^{\dagger})^N]$, y procediendo igual que antes, podemos llegar a que el único término no nulo de la expresión anterior es la constante 2, luego:

$$\langle \hat{\mathcal{L}}_0 \hat{\mathcal{L}}_0 \rangle = \frac{4 N a_2^2}{(N-1)! A^2} \langle 0 | \Gamma_g^{N-1} 2 (\Gamma_g^{\dagger})^{N-1} | 0 \rangle = \frac{8 N a_2^2}{A^2}. \quad (\text{B.26})$$

Los cálculos para $\hat{\mathcal{L}}_1 \hat{\mathcal{L}}_{-1}$ y $\hat{\mathcal{L}}_{-1} \hat{\mathcal{L}}_1$ son análogos, resultando ambos en:

$$\langle \hat{\mathcal{L}}_1 \hat{\mathcal{L}}_{-1} \rangle = \langle \hat{\mathcal{L}}_{-1} \hat{\mathcal{L}}_1 \rangle = -\frac{N}{A^2} (3a_0^2 + 2a_2^2), \quad (\text{B.27})$$

con lo que el operador $(\hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}})$ resulta:

$$\langle \hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}} \rangle = \frac{N}{A^2} (8a_2^2 + 6a_0^2 + 2a_2^2) \Rightarrow \langle \hat{\mathcal{L}} \cdot \hat{\mathcal{L}} \rangle = 6 \frac{N \beta^2}{1 + \beta^2}. \quad (\text{B.28})$$

El procedimiento para el resto de términos es similar al que hemos presentado aquí, y el resultado final es el obtenido en la ecuación (1.69).

Apéndice C

Resolución del potencial β^4

En este anexo, vamos a desarrollar el método de resolución del problema diferencial (2.41), que recordamos que es:

$$\varphi'' + \frac{1}{\beta}\varphi' + [\varepsilon + g_\tau(\beta)]\varphi = 0, \quad \varphi(0) = \varphi(+\infty) = 0, \quad (\text{C.1})$$

donde hemos definido la función auxiliar:

$$g_\tau(\beta) = -\beta^4 - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta^2}. \quad (\text{C.2})$$

Como hemos comentado en la Sección 2.2.2, esta ecuación no tiene soluciones analíticas, y debemos hacer la resolución numéricamente. Para este trabajo, hemos desarrollado un esquema de diferencias finitas para obtener los autovalores y autoestados de este sistema.

Para resolver numéricamente la ecuación (C.1), proponemos un esquema de diferencias finitas. El intervalo de definición de la ecuación es $0 < \beta < +\infty$. Obviamente, para hacer una resolución numérica, fijamos un límite superior $M < +\infty$; además, dado que la función $g_\tau(\beta)$ diverge en $\beta \rightarrow 0$, proponemos un límite inferior $\delta > 0$. Por tanto, resolveremos la ecuación en el intervalo $[\delta, M]$.

Ahora, consideramos una partición $\{\beta_n\}$ de N puntos del intervalo de resolución, con lo que los puntos toman los valores:

$$\beta_n = \delta + \frac{M - \delta}{N - 1}(n - 1), \quad (\text{C.3})$$

y el paso h del método es:

$$h = \beta_{n+1} - \beta_n = \frac{M - \delta}{N - 1}. \quad (\text{C.4})$$

La idea en el método de diferencias finitas es aproximar la solución φ en los puntos β_n . Notamos entonces $\varphi(\beta_n) \cong \varphi_n$.

Debemos buscar una forma de expresar las derivadas de φ en términos de estas aproximaciones. Para ello, usamos las aproximaciones centrales de primer y segundo orden:

$$\varphi'(\beta) \cong \frac{\varphi(\beta + h) - \varphi(\beta)}{h} \Rightarrow \varphi'_n \cong \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h}, \quad (\text{C.5})$$

$$\varphi''(\beta) \cong \frac{\varphi(\beta + h) - 2\varphi(\beta) + \varphi(\beta - h)}{h^2} \Rightarrow \varphi''_n \cong \frac{\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}}{h^2}. \quad (\text{C.6})$$

Para discretizar la función g_τ , basta con identificar los valores de β :

$$g_{\tau,n} = g_\tau(\beta_n) = -\beta_n^4 - \frac{(\tau + 3/2)^2}{\beta_n^2}. \quad (\text{C.7})$$

Por tanto, la discretización de la ecuación (C.1) es:

$$\begin{aligned} & -\frac{\varphi_{n+1} - 2\varphi_n + \varphi_{n-1}}{h^2} - \frac{1}{\beta_n} \frac{\varphi_{n+1} - \varphi_n}{h} g_{\tau,n} \zeta_n = \varepsilon \varphi_n \Rightarrow \\ \Rightarrow & -\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{\beta_n h}\right) \varphi_{n+1} + \left(\frac{2}{h^2} + \frac{1}{\beta_n h} - g_{\tau,n}\right) \varphi_n - \frac{1}{h^2} \varphi_{n-1} = \varepsilon \varphi_n, \quad n = 2, \dots, N-1. \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

En la ecuación anterior, no hemos incluido los casos de $n = 1, N$, ya que estos vienen fijados por las condiciones de contorno, $\varphi_0 = \varphi_{N+1} = 0$. Por tanto, tendremos para $n = 1$:

$$-\left(\frac{1}{h^2} + \frac{1}{\beta_1 h}\right) \varphi_2 + \left(\frac{2}{h^2} + \frac{1}{\beta_1 h} - g_{\tau,1}\right) \varphi_1 = \varepsilon \varphi_1. \quad (\text{C.9})$$

Y, para $n = N$:

$$\left(\frac{2}{h^2} + \frac{1}{\beta_N h} - g_{\tau,N}\right) \varphi_N - \frac{1}{h^2} \varphi_{N-1} = \varepsilon \varphi_N. \quad (\text{C.10})$$

Los resultados obtenidos en las ecuaciones (C.8), (C.9) y (C.10) se pueden expresar de forma matricial como:

$$A_\tau \vec{\varphi} = \varepsilon \vec{\varphi}, \quad (\text{C.11})$$

donde hemos introducido el vector de la solución aproximada:

$$\vec{\varphi} = (\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)^\top, \quad (\text{C.12})$$

y la matriz de diferencias finitas, A_τ , que es una matriz $N \times N$ que podemos definir como:

- La primera fila es:

$$\left(\left[\frac{2}{h^2} + \frac{1}{\beta_1 h} - g_{\tau,1} \right], - \left[\frac{1}{h^2} + \frac{1}{\beta_1 h} \right], 0, \dots, 0 \right). \quad (\text{C.13})$$

- La última fila es:

$$\left(0, \dots, 0, -\frac{1}{h^2}, \left[\frac{2}{h^2} + \frac{1}{\beta_N h} - g_{\tau,N} \right] \right). \quad (\text{C.14})$$

- Las filas $n = 2, \dots, N-1$ tienen las componentes:

$$(A_\tau)_{n,i} = \begin{cases} -1/h^2, & i = n-1, \\ 2/h^2 + 1/(\beta_n h) - g_{\tau,n}, & i = n, \\ -1/h^2 - 1/(\beta_n h), & i = n+1, \\ 0, & \text{en caso contrario.} \end{cases} \quad (\text{C.15})$$

Habiendo hecho esta definición del problema, hemos conseguido reducir la resolución de la ecuación diferencial (C.1) al cálculo de autovalores y autovectores de la matriz A_τ .

Como hemos comentado anteriormente, la función $g_\tau(\beta)$ es divergente en el origen; pese a haber eliminado esa divergencia al inicializar el algoritmo numérico en $\delta > 0$, esto puede seguir causando la

obtención de autovalores excesivamente grandes al resolver la ecuación. Por tanto, para hacer más eficiente el cálculo y obviar estas soluciones incorrectas, usamos un algoritmo que detecte los autovalores de menor módulo (que son los que nos interesan, dado que $\varepsilon \propto E$, y buscamos los estados de más baja energía), como el implementado en la función `eigs` de MATLAB.

Las soluciones obtenidas en la resolución de este problema tendrán la misma estructura que las que conseguimos analíticamente en el pozo infinito: serán funciones $\varphi_{\xi,\tau}$, donde el índice ξ viene de la discretización de las soluciones para cada τ .

Además, la representación gráfica de las autofunciones y la obtención de los ratios de transición requieren de una integración numérica del vector $\vec{\varphi}$ obtenido sobre el dominio discreto $\{\beta_n\}$. Esto lo podemos hacer mediante el uso de la función `trapz`, que usa el algoritmo de integración numérica por trapecios.

Como hemos comentado, el autovalor del problema diferencial, ε , es proporcional a la energía, E , según la relación definida en (1.18); por tanto, podemos volver a definir unas energías reducidas como:

$$e_{\xi,\tau} = \frac{E_{\xi,\tau} - E_{1,0}}{E_{1,1} - E_{1,0}} = \frac{\varepsilon_{\xi,\tau} - \varepsilon_{1,0}}{\varepsilon_{1,1} - \varepsilon_{1,0}}. \quad (\text{C.16})$$

En el siguiente apartado, incluimos el código de MATLAB escrito para implementar este esquema numérico.

C.1. Código de MATLAB

```

%% Resolucion por diferencias finitas

% Parametros del esquema numerico

eps = 1e-2;
M = 5;
N = 10000;
betas = linspace(eps,M,N);
h = betas(2)-betas(1);

% Definicion de la matriz

taus = 0:3; % Resolvemos para los estados de tau = 0,1,2,3
NTau = length(taus);
NXi = 4; % Resolvemos para los estados de xi = 1,2,3,4

% Guardamos las autofunciones (\phi) en una estructura tipo array
% tridimensional, con la tercera dimension asociada al indice tau

autoFunciones = zeros(N,NXi,NTau);
autoValores = zeros(NXi,NTau);

for i = 1:NTau
    gs = -betas.^4-((taus(i)+3/2).^2)./betas.^2;
    A = zeros(N,N);
    A(1,1) = (gs(1)-2/h^2-1/(h*betas(1)));
    A(1,2) = (1/h^2+1/(h*betas(1)));
    A(N,N) = (gs(N)-2/h^2-1/(h*betas(N)));
    A(N,N-1) = 1/h^2;
    for j = 2:(N-1)
        A(j,j-1) = 1/h^2;
        A(j,j+1) = (1/h^2+1/(h*betas(j)));
        A(j,j) = (gs(j)-2/h^2-1/(h*betas(j)));
    end
    A = -A;
    [autoFunc,autoVal] = eigs(A,NXi,'smallestabs');
    autoVal = diag(autoVal);
    % Calculo de la normalizacion
    autoFuncNorm = zeros(N,NXi);
    for j = 1:NXi
        phi2 = autoFunc(:,j).^2;
        C = 1/sqrt(trapz(betas,phi2'.*betas));
        C = abs(C); % Constante de normalizacion, tomada positiva
        autoFuncNorm(:,j) = C*autoFunc(:,j);
    end
    autoFunciones(:, :, i) = autoFuncNorm;
    autoValores(:,i) = autoVal;
end

```