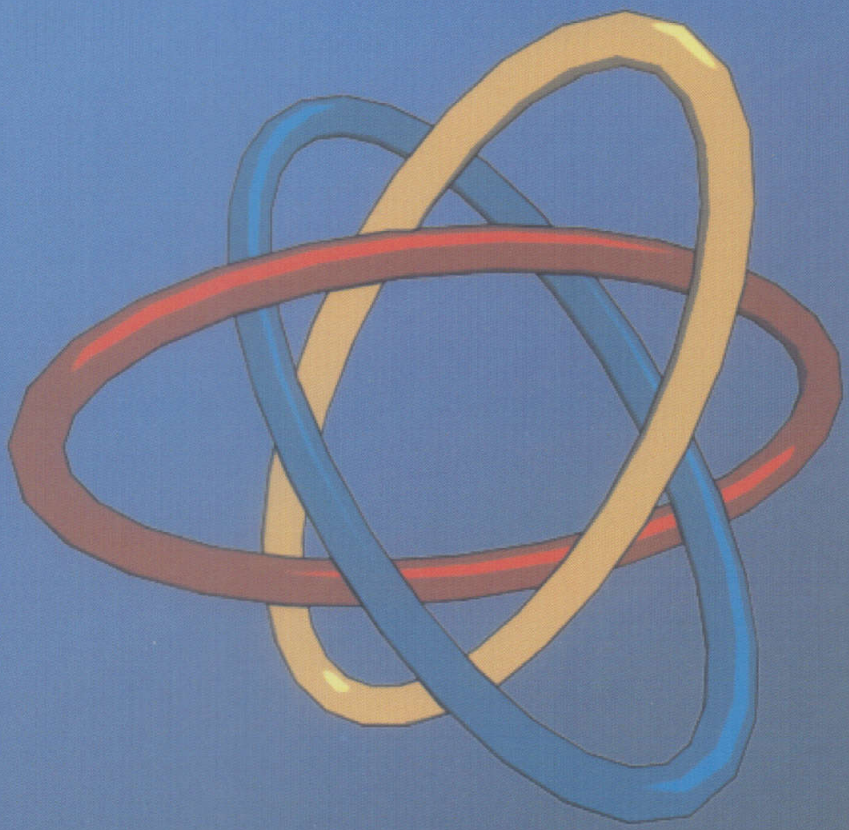
Descripción del continuo en una base discreta: estructura del núcleo ^{6}He y las reacciones que induce



Tesis Doctoral

Manuela Rodríguez Gallardo

T.S.
238

UNIVERSIDAD DE SEVILLA
SECRETARÍA GENERAL

Queda registrada esta Tesis Doctoral al folio 160 número 271 del libro correspondiente.
Sevilla, 26-09-05
El Jefe del Negociado de Tesis

T. S.-238

R. 11039887

Universidad de Sevilla

Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear

Descripción del continuo en una base discreta: estructura del núcleo ^{6}He y las reacciones que induce.

Memoria presentada para optar
al grado de Doctor en Física por
Manuela Rodríguez Gallardo

M. Rodríguez

Sevilla, septiembre de 2005

UNIVERSIDAD DE SEVILLA
BUS
600202592

i2109071

DIRECTORES:

Joaquín Gómez Camacho **José Miguel Arias Carrasco**

UNIVERSIDAD DE SEVILLA
FACULTAD DE FISICA
BIBLIOTECA

Los abajo firmantes, Joaquín Gómez Camacho y José Miguel Arias Carrasco, *profesores del Departamento de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad de Sevilla,*

CERTIFICAN *que la presente Memoria de Tesis, titulada* ***"Descripción del continuo en una base discreta: estructura del núcleo*** ^{6}***He y las reacciones que induce"****, ha sido realizada bajo nuestra dirección por Manuela Rodríguez Gallardo para optar al grado de Doctor en Física.*

Para que así conste, y en cumplimiento de la legislación vigente, firmamos el presente certificado.

Sevilla, septiembre de 2005

Joaquín Gómez Camacho **José Miguel Arias Carrasco**

A mis padres y abuelos

Mientras la ciencia a descubrir no alcance
las fuentes de la vida,
y en el mar o en el cielo haya un abismo
que al cálculo resista,
mientras la humanidad siempre avanzando
no sepa a do camina,
mientras haya un misterio para el hombre,
¡habrá poesía!

Gustavo Adolfo Bécquer

Agradecimientos

Tras finalizar esta memoria de tesis siento la necesidad de dar las gracias a mucha gente que, de una forma u otra, ha hecho posible que me encuentre en este momento.

En primer lugar, tengo que agradecer a mis dos directores de tesis, José Miguel Arias Carrasco y Joaquín Gómez Camacho, tanto su confianza en mí como su ayuda y su paciencia. A Pepe por confiar en mí desde el día en el que aceptó ser mi director como alumna interna. A Joaquín por dirigirse directamente a mí para ofrecerme la posibilidad de hacer la tesis en este grupo.

En segundo lugar, siento la necesidad de dar las gracias especialmente a Antonio Moro, que poco a poco se ha convertido en uno de mis pilares de apoyo. Aparte de colaborar de forma muy activa en el desarrollo de gran parte del trabajo presentado en esta memoria, ha sido también un estupendo compañero de trabajo, convirtiéndose en un gran amigo.

Tengo que agradecer a los profesores Ian Thompson y Jeff Tostevin su acogida en el Departamento de Física de la Universidad de Surrey y su colaboración en el desarrollo del trabajo, el cual no hubiera sido posible sin su ayuda. También he de agradecer al profesor Ron Johnson las conversaciones tan productivas que tuvimos durante mis estancias en Surrey, así como el interés mostrado por mi trabajo.

No me puedo olvidar tampoco del director de mi departamento, el profesor Manuel Lozano Leyva, al que tengo que agradecer su ayuda y sus consejos en momentos difíciles.

También tengo que dar las gracias, cómo no, a todos los que me han ayudado ya sea con la informática, ya con el trabajo o con ambos a la vez. Entre ellos, me gustaría mencionar a Curro, Alberto y Feli. En general, tengo que agradecer a todo el grupo su buena acogida y el buen ambiente que existe desde el punto

de vista personal y laboral.

No me gustaría dejar fuera a mis compañeros y amigos de carrera que compartieron conmigo, y algunos aún comparten, penas y alegrías. Tampoco quiero olvidar a mis nuevos compañeros y amigos del departamento que hacen más ameno el arduo trabajo.

Por último, tengo que dar las gracias a mi familia, especialmente a mis padres y mis abuelos, porque si no fuera por ellos yo no habría llegado hasta aquí. Pese a que ninguno de ellos tuvo las mismas oportunidades que yo, siempre me han apoyado y han hecho hasta lo imposible para que yo sí tuviera todas las puertas abiertas. A mi hermano le doy las gracias por la portada de este trabajo.

Finalmente, no me gustaría acabar estas palabras sin agradecer a todos en general y en especial a mis directores, Pepe y Joaquín, a Antonio y a mi familia, por haber soportado mis momentos de agobio y desesperación, que han sido muchos a lo largo de estos cuatro años. Soy consciente de lo irritable que he llegado a estar y todos ellos han sabido sobrellevar tales situaciones sin dejar de apoyarme. Gracias.

Prefacio

Esta memoria de tesis surge como un intento de tratar de un modo sencillo los sistemas débilmente ligados que existen en la naturaleza y que son de interés tanto en física nuclear como atómica y molecular e incluso en química. En este trabajo se presenta un estudio tanto de las propiedades de estos sistemas como de las reacciones que inducen. En ellos cobran una especial relevancia los estados del continuo de dispersión, ya que al estar débilmente ligados se rompen fácilmente en sus constituyentes. Esto supone la necesidad de tratar con estos estados no ligados o estados de dispersión cuyas funciones de onda no son normalizables y cuyas energías forman un continuo. En general, la inclusión de tales estados supone un problema para determinados cálculos y hay que recurrir a métodos aproximados para su tratamiento. En concreto, en la literatura existen diversos métodos de discretización que sustituyen el continuo real por un número finito de estados normalizables. Aquí se propone un método alternativo de discretización basado en polinomios ortogonales (Orthogonal Polynomial, OP) para el tratamiento del continuo de dispersión. Este método proporciona una base discreta, completa y ortonormal en la cual se diagonaliza el hamiltoniano del sistema. Los estados obtenidos de dicha diagonalización se toman como representativos tanto de los estados ligados como del continuo.

El trabajo presentado en esta memoria se centra en la física nuclear y en el estudio de núcleos alejados del valle de estabilidad. En la última década, se han llevado a cabo progresos significativos, tanto experimental como teóricamente, en el campo de los haces de iones radiactivos. Esto junto con los desarrollos en instrumentación nuclear ha hecho posible explorar regiones desconocidas de la tabla periódica, fuera del valle de estabilidad. En estas zonas se encuentran núcleos con configuraciones exóticas de protones y neutrones. Entre éstos, un caso de especial relevancia es el de los núcleos con halo, en los que una o más partícu-

las tienen una gran probabilidad de encontrarse a distancias considerablemente mayores que los radios nucleares típicos. Un caso particular de núcleos con halo es el de los llamados núcleos borromeos. Éstos son sistemas con características muy especiales, compuestos por tres partículas, un core más dos nucleones de valencia, sin la existencia de subsistemas binarios ligados.

Esta memoria puede dividirse en dos partes diferenciadas. En la primera se presenta un estudio para un sistema de dos cuerpos en un potencial central que es resoluble analíticamente, el potencial de Ginocchio, como un primer test del método de discretización propuesto. Concretamente se estudia cómo la base discreta generada por dicho método describe el continuo del sistema, tanto resonante como no resonante. La parte resonante del continuo es aquélla en la cual las funciones de onda tienen una probabilidad mucho mayor de encontrarse dentro del rango del potencial y, por lo tanto, esta parte del continuo juega un papel más importante que la parte no resonante en el acoplamiento con los estados ligados.

En la segunda parte se presenta una aplicación más ambiciosa, concretamente se discute la descripción del núcleo borromeo ^{6}He. Para llevar a cabo esta tarea hay que generalizar el método de discretización para sistemas de tres cuerpos. Dentro de esta parte del trabajo, primero se llevan a cabo cálculos de estructura para dicho sistema utilizando la base discreta generada y comprobando cómo los cálculos convergen para diferentes observables. Después se realizan cálculos de dispersión del núcleo ^{6}He por un blanco pesado, ^{208}Pb. Para ello, se utiliza como base del proyectil la de los estados generados diagonalizando el hamiltoniano en la base discreta que proporciona el método de discretización propuesto. En el cálculo de dispersión se utiliza el método de canales acoplados discretizados en el continuo (Continuum Discretized Coupled Channels, CDCC), una vez que se ha calculado la forma explícita de los potenciales de acoplamiento para un sistema de tres cuerpos.

Los resultados obtenidos en este trabajo permiten concluir que el método de discretización propuesto es adecuado para la descripción del continuo de energía de sistemas de dos y tres cuerpos, tanto de su parte resonante como no resonante. También se puede concluir que el método es adecuado tanto para cálculos de estructura como de reacciones.

Índice

1. Introducción **5**

1.1. Motivación y antecedentes 5

1.2. Sistemas de tres cuerpos: núcleos borromeos 11

1.2.1. Métodos para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos . 13

1.2.2. Tratamiento del principio de Pauli 17

1.3. Tratamiento del continuo 21

1.3.1. Métodos de discretización 21

1.3.2. Continuo resonante 24

1.4. Método de polinomios ortogonales (OP) 27

1.5. Tratamiento de colisiones con acoplamiento al continuo 41

2. Tratamiento de resonancias **53**

2.1. Método OP para sistemas de dos cuerpos con simetría esférica . . 53

2.1.1. Método del oscilador armónico transformado (THO) 55

2.1.2. Método de polinomios ortogonales en la variable trivial (TOP) 56

2.2. Potencial de Ginocchio 58

2.2.1. Estados discretos: ligados, ligados virtuales, virtuales y resonantes 61

2.2.2. Estados del continuo 63

2.2.3. Casos particulares 64

2.3. Descripción de la resonancia en una base discreta 70

2.3.1. Construcción de la base discreta con el método THO . . . 71

2.3.2. Diagonalización del hamiltoniano 74

2.3.3. Descripción de la resonancia 79

2.3.4. Acoplamiento del estado fundamental con el continuo . . . 86

2.3.5. Comparación con el método TOP 89

3. Método THO para sistemas de tres cuerpos: aplicación al núcleo ^{6}He 101

3.1. Método de discretización 102
3.1.1. Canales no incluidos en el estado fundamental 104
3.2. Aplicación al núcleo ^{6}He 105
3.2.1. Hamiltoniano del núcleo ^{6}He 106
3.2.2. Estado fundamental del núcleo ^{6}He 109
3.2.3. Aplicación del método THO 113
3.2.4. Diagonalización del hamiltoniano en la base THO 116
3.3. Funciones de intensidad 120
3.3.1. Probabilidad de transición reducida $B(E\lambda)$ 122
3.3.2. Distribuciones de $B(E\lambda)$ 124

4. Reacciones: aplicación a ^{6}He+^{208}Pb 133

4.1. Función de onda del sistema de cuatro cuerpos 135
4.2. Desarrollo multipolar del potencial 136
4.3. Reacción ^{6}He+^{208}Pb 143
4.3.1. Factores de forma 145
4.3.2. Cálculo de canales acoplados 147
4.3.3. Secciones eficaces 152

5. Resumen y conclusiones 159

A. Herramientas para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos 165

A.1. Coordenadas 165
A.1.1. Coordenadas de Jacobi 165
A.1.2. Coordenadas hiperesféricas 167
A.2. Armónicos hiperesféricos 168
A.3. Base del oscilador armónico (HO) 170

B. Desarrollos algebraicos relevantes para el capítulo 3 173

B.1. Expresión cerrada para $B(E\lambda)$ 173
B.2. Regla de suma de $B(E\lambda)$ 178

C. Programa FaCE **185**

C.1. La base de tres cuerpos 185

C.2. Elementos de matriz 188

C.3. Estados prohibidos de Pauli 193

Capítulo 1

Introducción

Este trabajo se enmarca dentro de la tarea de explicar la estructura y los mecanismos de reacción de sistemas con características especiales, como son los núcleos borromeos que se componen de tres partículas sin la existencia de subsistemas binarios. En el apartado 1.1 de esta introducción se expondrá la motivación de este trabajo y se hará una revisión histórica de los avances relevantes previos. En el apartado 1.2 se presentarán los distintos métodos desarrollados para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos, además de los diferentes procedimientos que existen para el tratamiento del principio de Pauli para estos sistemas. En el apartado 1.3 se discutirá el problema del continuo en un sistema mecano-cuántico general, haciéndose un resumen de los diferentes métodos de discretización que existen en la literatura. En particular se explicará el caso en el cual el continuo presenta estados resonantes. En el apartado 1.4 se presentará el método de discretización basado en polinomios ortogonales (Orthogonal Polynomial, OP), que se utiliza a lo largo de este trabajo. Por último, en el apartado 1.5 se describirá detalladamente el método de canales acoplados discretizados en el continuo (Continuum Discretized Coupled Channels, CDCC), ampliamente usado para el tratamiento de colisiones con acoplamiento al continuo.

1.1. Motivación y antecedentes

En el corazón de todos los átomos que conforman el universo se encuentra el núcleo atómico, un diminuto sistema con un número bien definido de protones, Z, y neutrones, N. Aunque de dimensión despreciable en comparación con la del

átomo, el núcleo representa el 99 % de la masa de éste y, en consecuencia, de toda la masa visible del universo. Entender sus propiedades es, por lo tanto, una necesidad vital y un reto intelectual para la humanidad. El núcleo atómico es un laboratorio único para el estudio de diferentes fenómenos físicos fundamentales. Por una parte, el núcleo se compone de un número finito de fermiones fuertemente interactuantes y, por otra, sus propiedades están gobernadas por la competencia entre las interacciones electromagnética, débil y fuerte. Al ser los núcleos constituyentes básicos de la materia, la comprensión de su estructura y sus mecanismos de reacción son fundamentales en otros campos como los modelos de pocos cuerpos usados en física atómica y molecular, diversas cuestiones astrofísicas como la nucleosíntesis, estudios de interacciones fundamentales y el modelo estándar, así como numerosas aplicaciones. El núcleo es un sistema finito de muchos cuerpos que interactúan a través de la interacción fuerte, que no puede ser tratada de un modo perturbativo, y donde, en general, el pequeño número de nucleones no permite el uso de métodos estadísticos de gran utilidad en otros campos. Así, el núcleo atómico es uno de los más ricos y desafiantes sistemas cuánticos en la naturaleza. Los esfuerzos en investigación que se han llevado a cabo recientemente han abierto nuevos caminos que podrían conducir a una descripción más completa y precisa del mismo. El objetivo final de la investigación en estructura nuclear es construir una teoría unificada de la materia nuclear y los núcleos finitos, desde los núcleos estables fuertemente ligados a los inestables débilmente ligados, desde los núcleos muy ligeros a los muy pesados.

En el pasado los núcleos han proporcionado sorpresas y desafíos cada vez que se han introducido nuevas técnicas de detección y aceleradores más avanzados junto con el desarrollo de nuevos modelos teóricos. Estos logros van desde la generación de energía con reactores nucleares hasta el tratamiento y la terapia de tumores en medicina. El conocimiento actual de la estructura nuclear se basa principalmente en las propiedades de los núcleos que se encuentran próximos al valle de estabilidad. Durante la última década, se han realizado progresos significativos, tanto experimental como teóricamente, en el campo de los haces de iones radiactivos (Radioactive Ion Beams, RIB) que junto con los desarrollos en instrumentación han permitido explorar territorios desconocidos de la tabla periódica, haciendo posible el desplazamiento fuera del valle de estabilidad y la realización de estudios sin precedentes. Gran parte de los esfuerzos recientes llevados a cabo

en física nuclear se han encaminado a la comprensión de los llamados núcleos exóticos, que consisten en sistemas nucleares con una proporción de protones y neutrones muy diferente a la de los núcleos ordinarios. Estos núcleos están próximos a una de las líneas de evaporación, por lo que se trata de núcleos de vida corta, que decaen en un breve lapso de tiempo en una combinación de núcleos estables. Una revisión reciente de estos sistemas y sus mecanismos de reacción se recoge en la referencia [1]. La descripción teórica de los núcleos próximos a las líneas de evaporación es un desafío emocionante ya que se ha encontrado que muchas herramientas teóricas estándar usadas en modelos tradicionales no sirven para la descripción de reacciones que incluyen núcleos exóticos ligeros producidos en los RIB, siendo un tema importante la competencia entre las interacciones nuclear y coulombiana. Las nuevas instalaciones experimentales en RIKEN (Japón) y en GSI (Alemania) proporcionarán nuevos modos de estudiar la estructura de los núcleos exóticos ligeros a través de dispersión elástica e inelástica de electrones y reacciones directas (*knockout*). En este área, el soporte teórico será vital y un gran desafío será incorporar en los modelos de reacción la información microscópica suficientemente detallada sobre la estructura interna de los núcleos interactuantes. Para el estudio de los núcleos exóticos en la Tierra es necesario producirlos primero a partir de los RIB en las nuevas instalaciones experimentales. Sin embargo algunos núcleos exóticos se producen de forma natural en ambientes más hostiles que la Tierra. Éstos aparecen como productos intermedios en algunas de las reacciones nucleares por las que las estrellas producen energía, en las últimas etapas de la vida de las estrellas y en las explosiones de supernovas. Además, los núcleos de la línea de evaporación de neutrones son los constituyentes más probables de la corteza de las estrellas neutrónicas.

Un caso especialmente interesante de sistemas exóticos es el de los llamados núcleos con halo, consistentes en sistemas débilmente ligados, en los que una o más partículas tienen una gran probabilidad de encontrarse a distancias considerablemente mayores que los radios nucleares típicos. Cuando la energía de ligadura de un nucleón es muy baja, una fracción significativa de la función de onda del mismo puede estar fuera del core y esta nube nuclear difusa que rodea al núcleo es lo que se llama halo. Este nombre se toma de la palabra que los meteorólogos usan para describir el anillo luminoso que se produce alrededor de objetos astronómicos tales como el Sol o la Luna. El término halo de neutrones

se introdujo por primera vez en 1969 [2]. Una revisión de las propiedades generales y de los mecanismos de reacción de los núcleos con halo se presenta en las referencias [3–5]. El fenómeno del halo nuclear se trata básicamente de un efecto umbral resultante de la presencia de un estado ligado muy próximo al continuo. Una característica común de los sistemas poco ligados es su pequeña energía de separación y, por tanto, su elevada probabilidad de ruptura. Este proceso puede entenderse como una excitación del núcleo a estados excitados en la parte continua del espectro energético. La estructura de halo presenta hechos experimentales muy característicos, tales como secciones eficaces grandes para los procesos de disociación eléctrica y nuclear. Pero lo más sorprendente es que las reacciones en las que el sistema con halo se rompe están asociadas a distribuciones de momento de los fragmentos extremadamente estrechas. Los halos de neutrones y protones son igualmente posibles pero los de protones son menos pronunciados, debido a la fuerte influencia de la barrera coulombiana. Los estados con halo más interesantes son aquéllos que tienen un número par de neutrones. Por ejemplo, la partícula α ligará dos neutrones pero no uno y cuatro pero no tres. Esta selección es meramente un resultado de la energía de apareamiento.

Históricamente, el primer núcleo en el que se evidenció la relevancia de los canales de ruptura en los mecanismos de reacción fue el deuterón. Su pequeña energía de ligadura (2,22 MeV) y su elevada extensión espacial (la separación cuadrática media protón-neutrón es de unos 4 fm) le confieren características similares a las de los núcleos con halo, pudiéndosele considerar como su precursor. No es extraño, entonces, que el estudio de reacciones con deuterones condujera al descubrimiento de los principales mecanismos de reacción que más tarde se han estudiado en el ámbito de los núcleos con halo. Entre ellos se pueden citar la disociación coulombiana [6, 7], las reacciones de captura (*stripping*) [8] y la disociación difractiva, también llamada ruptura elástica [9]. En general, la información experimental detallada que se tiene sobre la estructura de halo se obtiene de las reacciones de ruptura y de los experimentos de decaimiento β [10–12]. Ejemplos típicos de núcleos con halo son ^{11}Be y ^{19}C, los cuales se describen en términos de dos cuerpos, el core, de ^{10}Be y ^{18}C respectivamente, y el neutrón del halo. Las propiedades básicas de los sistemas con halo de un neutrón están recogidas en la referencia [13]. Pero no todos los núcleos con halo encajan bien en esta descripción de dos cuerpos. Un caso claro es el de los llamados núcleos

borromeos, que toman su nombre de un símbolo heráldico renacentista italiano y que consisten en sistemas de tres cuerpos donde ninguno de los subsistemas binarios está ligado pero sí lo está el sistema de tres cuerpos. Dentro de éstos los que más interés han suscitado son ^{11}Li y ^{6}He. En las referencias [14, 15] se presenta una revisión de las propiedades de los núcleos con halo de dos neutrones. Cabe comentar aquí que en un estudio reciente [16] se ha mostrado cómo la interacción entre los dos neutrones del halo es la responsable de la aparición del estado ligado de tres cuerpos. En la figura 1.1 se muestra un gráfico de los anillos borromeos.

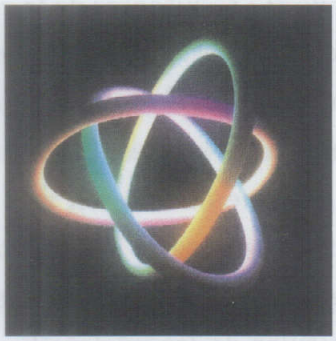


Figura 1.1: *Anillos borromeos.*

Haciendo una revisión histórica, el primer caso de un halo de neutrones fue descubierto por Millener et al. [17], cuyo experimento en 1983 confirmó que la probabilidad de transición $E1$ entre los dos estados ligados de ^{11}Be era sorprendentemente grande. Pero el interés actual en los halos nucleares procede de una serie de experimentos realizados por Tanihata et al. [18], que en 1985 usaron RIB a 790 MeV/u en el separador de fragmentos de Lawrence Laboratory-Bevalac para medir secciones eficaces de interacción de núcleos ligeros. Tanihata et al. encontraron valores sorprendentemente grandes para los isótopos ^{6}He, ^{8}He y ^{11}Li. En un primer momento, esto se interpretó como consecuencia bien de una deformación muy grande o bien de una larga cola en la distribución de materia. Sin embargo, experimentos realizados posteriormente en ISOLDE, en el CERN, demostraron que los momentos cuadrupolar eléctrico y dipolar magnético para ^{9}Li y ^{11}Li eran muy similares [19], por lo que también eran similares sus distribuciones de carga. Por lo tanto, se concluyó que el incremento en el radio se debía a la cola de neutrones. Se ha observado también el efecto de que el halo está asociado con secciones eficaces de disociación coulombiana grandes para reacciones

con blancos pesados [20]. Otra demostración de la estructura de halo fue dada por Blank et al. [21], que en 1992 mostraron que mientras las secciones eficaces de interacción aumentan monótonamente a lo largo de la secuencia ^{8}Li, ^{9}Li, ^{11}Li, las secciones eficaces para reacciones que cambian el número de protones en el proyectil permanecen constantes como función de la masa. También son una herramienta importante para estudiar la estructura de halo las distribuciones de momento de los fragmentos que se forman tras la ruptura de los estados de halo. En esta línea, Kobayashi et al. [22] en 1988 encontraron distribuciones de momento transversales de fragmentos de ^{9}Li resultantes de la ruptura de un haz de ^{11}Li a 790 MeV/u sorprendentemente estrechas. Por otro lado, hay también candidatos para núcleos con halo de protones siendo el mejor explorado ^{8}B, el cual es famoso por su papel como fuente de neutrinos solares. La prueba experimental fue dada en 1999 por Smedberg et al. [23] que observaron una distribución de momento longitudinal estrecha para los fragmentos de ^{7}Be a partir de la ruptura de ^{8}B. En la figura 1.2 se presenta el diagrama de Segré donde aparece el esquema actual de los núcleos con halo y en particular de los núcleos borromeos. Aparecen ^{11}Be y ^{19}C como núcleos con halo de un neutrón, ^{8}B como núcleo con halo de un protón, ^{6}He, ^{11}Li, ^{14}Be, ^{17}B y ^{22}C como núcleos borromeos con halo de dos neutrones y ^{17}Ne como núcleo borromeo con halo de dos protones.

Todo esto lleva a un campo de investigación donde queda mucho trabajo por realizar. Se necesitan modelos teóricos que expliquen la estructura y los mecanismos de reacción de sistemas con características tan especiales como los núcleos borromeos. Este trabajo se enmarca dentro de esta tarea y trata de arrojar un poco de luz sobre el tema, proponiendo para ello un método de trabajo y haciendo uso también de técnicas bien establecidas para sistemas más sencillos. Por la parte experimental, el rápido desarrollo actual de las técnicas de haces nucleares radiactivos en muchas instalaciones nucleares en el mundo promete un buen progreso en el futuro próximo. Además, el interés en estados poco ligados borromeos de tres partículas es actualmente grande también en física molecular [24–26] y química [27–30].

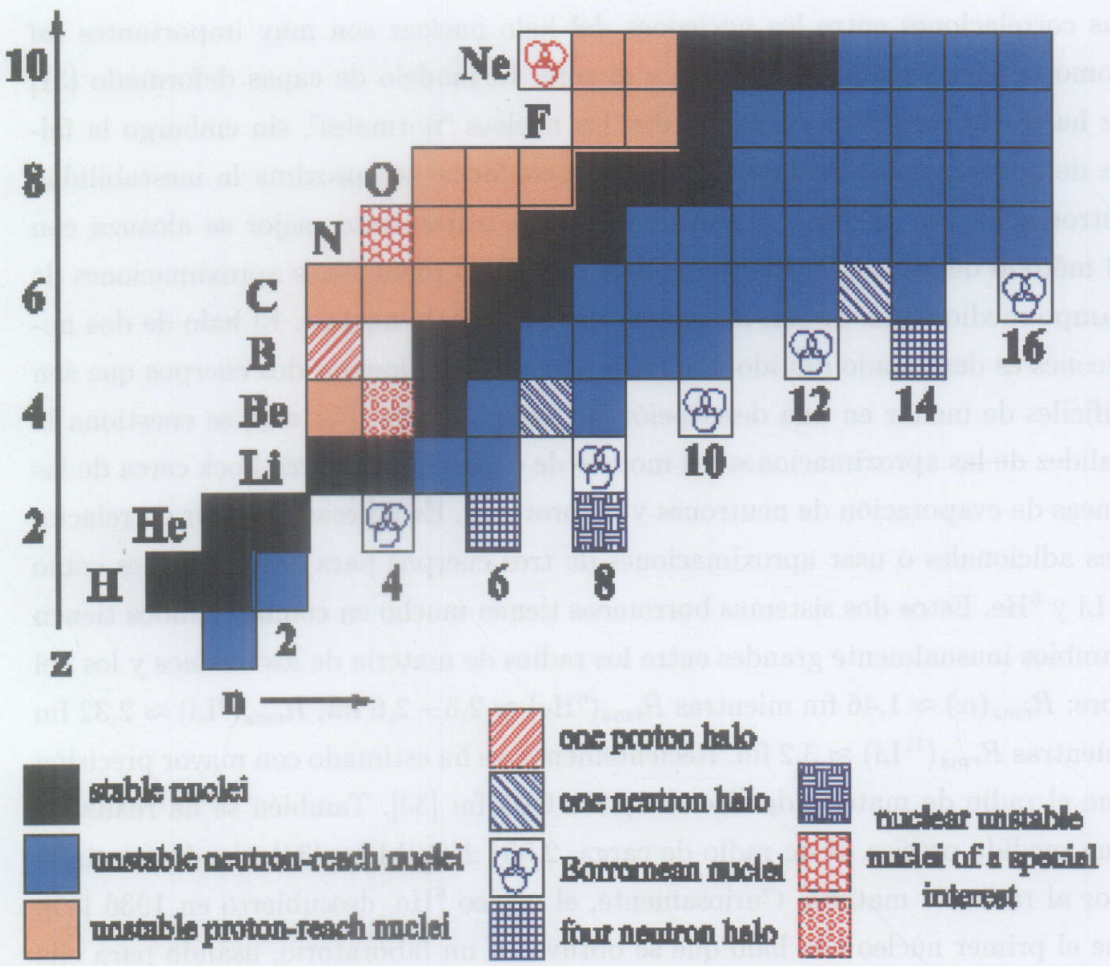


Figura 1.2: *Diagrama de Segré.*

1.2. Sistemas de tres cuerpos: núcleos borromeos

En este apartado se va a tratar cómo abordar un problema de tres cuerpos, como es el caso de los núcleos borromeos. Un problema de tres cuerpos implica un grado de complejidad superior a un problema de dos cuerpos y requiere un gran esfuerzo desde el punto de vista teórico y de cálculo. Se comenzará comentando las técnicas utilizadas para otros sistemas más simples y después se hará una recopilación de diversos métodos desarrollados para tratar sistemas de tres cuerpos.

En general, los núcleos con halo tienen grados de libertad relevantemente diferentes a los de los núcleos próximos al valle de estabilidad. En primer lugar,

las correlaciones entre los nucleones del halo nuclear son muy importantes así como las que existen entre éstos y el core. El modelo de capas deformado [31] se ha usado con éxito para describir los núcleos "normales", sin embargo la falta de autoconsistencia llega a ser crítica conforme se aproxima la inestabilidad introducida por la línea de evaporación. Un tratamiento mejor se alcanza con el método de Hartree-Fock-Bogoliubov [32]. Pero todas estas aproximaciones de campo medio dejan de servir cuando aparece el halo nuclear. El halo de dos nucleones es demasiado diluido y además tiene correlaciones a dos cuerpos que son difíciles de incluir en una descripción de campo medio. Por ello, se cuestiona la validez de las aproximaciones del modelo de capas y de Hartree-Fock cerca de las líneas de evaporación de neutrones y de protones. Es necesario incluir correlaciones adicionales o usar aproximaciones de tres cuerpos para sistemas tales como ^{11}Li y ^{6}He. Estos dos sistemas borromeos tienen mucho en común. Ambos tienen cambios inusualmente grandes entre los radios de materia de los mismos y los del core: $R_{rms}(\alpha) \approx 1{,}46$ fm mientras $R_{rms}(^{6}\mathrm{He}) \approx 2{,}5 - 2{,}6$ fm; $R_{rms}(^{9}\mathrm{Li}) \approx 2{,}32$ fm mientras $R_{rms}(^{11}\mathrm{Li}) \approx 3{,}2$ fm. Recientemente, se ha estimado con mayor precisión que el radio de materia de ^{6}He es $2{,}59 \pm 0{,}05$ fm [33]. También se ha realizado una medida precisa de su radio de carga, $2{,}054 \pm 0{,}014$ fm [34], siendo éste inferior al radio de materia. Curiosamente, el núcleo ^{6}He, descubierto en 1936 [35], fue el primer núcleo con halo que se obtuvo en un laboratorio, usando para ello un haz de neutrones sobre un blanco de ^{9}Be, sólo unos pocos años después del descubrimiento del neutrón. El descubrimiento de ^{11}Li fue realizado 30 años más tarde [36].

Para el estudio de estos núcleos como ^{6}He y ^{11}Li, a los que no se les puede aplicar las técnicas utilizadas para núcleos estables y que, además, presentan la complejidad de tener una estructura de tres cuerpos, core más dos neutrones de valencia, se han desarrollado una serie de métodos que se presentan brevemente en el subapartado siguiente. El apéndice A será de utilidad en los desarrollos que siguen.

1.2.1. Métodos para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos

En la referencia [14] se presenta una revisión de los distintos métodos usados para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos, en especial de los núcleos borromeos ^{11}Li y ^{6}He. A continuación se presentan algunos de dichos métodos esquemáticamente:

- Desarrollo en armónicos hiperesféricos (Hyperspherical Harmonics, HH).

  En un modelo de tres cuerpos core+$n+n$ se acepta que la función de onda total Φ es un producto de la forma

  $$\Phi = \phi_c(\xi_c)\psi_{j\mu}(1,2), \tag{1.1}$$

  donde $\phi_c(\xi_c)$ es la función de onda intrínseca del core, normalmente inactivo[1], mientras que $\psi_{j\mu}(1,2)$ es la parte activa. Esta última depende tanto de las coordenadas relativas como de los espines de los dos nucleones de valencia, por lo tanto es invariante traslacionalmente y el objeto de cálculo. $\psi_{j\mu}(1,2)$ es solución de la ecuación de Schrödinger de tres cuerpos,

  $$(\widehat{T} + \widehat{V} - \varepsilon)\psi_{j\mu}(1,2) = 0, \tag{1.2}$$

  donde $\widehat{T}$ es el operador energía cinética, $\widehat{V}$ es el potencial $\widehat{V} = \widehat{V}_{c1} + \widehat{V}_{c2} + \widehat{V}_{12}$, siendo $\widehat{V}_{c1}$ el potencial de interacción binario entre el core y la partícula 1, $\widehat{V}_{c2}$ el potencial de interacción binario entre el core y la partícula 2 y $\widehat{V}_{12}$ el potencial de interacción binario entre las dos partículas del halo, y ε es la energía medida desde el umbral de tres cuerpos.

  Haciendo uso del sistema de Jacobi en el cual los dos nucleones de valencia están relacionados por la coordenada $\vec{x}$, la función $\psi_{j\mu}$ se puede expresar en el método HH y en representación LS como

  $$\psi_{j\mu} = \rho^{-5/2} \sum U^{lS_x j}_{Kl_x l_y}(\rho) \left[\Upsilon^{l_x l_y}_{Kl}(\Omega) \otimes \chi_{S_x}\right]_{j\mu}, \tag{1.3}$$

  donde $U^{lS_x j}_{Kl_x l_y}(\rho)$ es la función hiperradial, $\chi_{S_x}(1,2)$ es la función del espín acoplado de los dos nucleones y $\Upsilon^{l_x l_y}_{Klm_l}(\Omega)$ son los armónicos hiperesféricos,

[1] Además, por simplicidad se va a considerar que el core tiene espín cero.

que tienen la forma explícita

$$\Upsilon^{l_x l_y}_{K l m_l}(\Omega) = \varphi^{l_x l_y}_K(\alpha) \left[Y_{l_x}(\widehat{x}) \otimes Y_{l_y}(\widehat{y}) \right]_{l m_l}, \tag{1.4}$$

$$\varphi^{l_x l_y}_K(\alpha) = N^{l_x l_y}_K (\text{sen}\,\alpha)^{l_x} (\cos\alpha)^{l_y} P^{l_x+1/2, l_y+1/2}_n(\cos 2\alpha). \tag{1.5}$$

Aquí $\{\rho, \Omega\}$, con $\Omega \equiv \{\alpha, \widehat{x}, \widehat{y}\}$, son las coordenadas hiperesféricas, K es el momento hiperangular, l_x y l_y son los momentos angulares orbitales asociados a las coordenadas de Jacobi $\vec{x}$ e $\vec{y}$, respectivamente y $P^{a,b}_n(\beta)$ es un polinomio de Jacobi de orden $n = (K - l_x - l_y)$. Todo esto está convenientemente explicado en el apéndice A.

Cuando el desarrollo (1.3) se inserta en (1.2) se obtiene un conjunto de ecuaciones diferenciales acopladas unidimensionales en la variable ρ que se resuelve numéricamente, lo cual se explica en detalle en las referencias [37,38]. Para estados ligados se tiene que $U(\rho) \to 0$ para $\rho \to \infty$ y para potenciales a dos cuerpos de rango finito, la forma asintótica de estas funciones de onda de tres cuerpos es $U(\rho) \to \exp(-\kappa\rho)$ siendo $\hbar^2\kappa^2/2m = -\varepsilon$, donde m es una masa arbitraria de normalización que se toma como la masa del nucleón y que aparece en la definición del hiperradio (A.12). Como los núcleos borromeos están muy débilmente ligados, este comportamiento asintótico es una buena aproximación a la función de onda en una región muy extensa.

En los cálculos HH la convergencia de la función de onda es muy rápida, pero es bastante lenta para la energía de ligadura. Sólo se necesita calcular hasta $K \leq 6$ para obtener la función de onda con una precisión del 1 %, pero si se quiere investigar la convergencia de la energía de ligadura hay que extender el cálculo hasta $K = 16 - 26$.

El principio de Pauli se tiene en cuenta introduciendo una interacción adicional repulsiva en las componentes parciales de las interacciones efectivas entre grupos de nucleones y fijando estas interacciones a los corrimientos de fase experimentales.

- Aproximación de Faddeev en el espacio de coordenadas (Coordinate Space Faddeev approach, CSF).

  La función de onda de tres cuerpos se representa como una suma de tres componentes

$$\psi = \psi_{12} + \psi_{c1} + \psi_{c2}, \tag{1.6}$$

donde cada componente ψ se expresa en sus coordenadas naturales de Jacobi (ver apéndice A). El problema de autovalores de tres cuerpos se reescribe como un conjunto ecuaciones acopladas de Faddeev [39, 40]

$$(\varepsilon - \widehat{T} - \widehat{V}_{12})\psi_{12} = \widehat{V}_{12}(\psi_{c1} + \psi_{c2}), \tag{1.7}$$

$$(\varepsilon - \widehat{T} - \widehat{V}_{c1})\psi_{c1} = \widehat{V}_{c1}(\psi_{c2} + \psi_{12}) + P_{c1}, \tag{1.8}$$

$$(\varepsilon - \widehat{T} - \widehat{V}_{c2})\psi_{c2} = \widehat{V}_{c2}(\psi_{c1} + \psi_{12}) + P_{c2}. \tag{1.9}$$

Los términos $P_{ci}(i = 1, 2)$ tienen en cuenta el principio de excusión de Pauli entre los nucleones de valencia y los del core, penalizando los estados de los nucleones que solapan con los estados ya ocupados en el core. Estas ecuaciones se resuelven numéricamente. Introduciendo otra vez las coordenadas hiperesféricas, cada una de las componentes de Faddeev tiene de nuevo la dependencia asintótica en ρ dada por $U(\rho) \to \exp(-\kappa\rho)$.

Para estados ligados los métodos HH y CSF dan soluciones idénticas en principio, incluyendo el mismo comportamiento asintótico. Aunque el método HH parece más simple, la aproximación CSF tiene ciertas ventajas como permitir elegir un espaciado variable en las coordenadas de Jacobi $\vec{x}$ e $\vec{y}$.

- Modelo de capas de orbitales para grupos de nucleones (Cluster-Orbital Shell Model, COSM).

  Este modelo fue planteado [41] para describir un sistema de varios nucleones de valencia acoplados a un core. Introduce coordenadas invariantes traslacionalmente entre el core y los nucleones de valencia.

  Las órbitas monoparticulares se pueden determinar consistentemente con potenciales de interacción entre el core y el nucleón de valencia. Estos potenciales pueden ser diferentes del potencial para el nucleón en el core. Por lo tanto, el método COSM es una versión extendida del modelo de capas. Presenta problemas con la convergencia de la energía de ligadura del sistema de tres cuerpos. Estos problemas están relacionados con la elección de coordenadas invariantes traslacionalmente entre el core y los nucleones de valencia, ya que estas no son ortogonales como las coordenadas de Jacobi para un problema de tres cuerpos. De esta forma aparece un término de

mezcla $\nabla_{1c} \cdot \nabla_{2c}$ en el operador energía cinética, el cual es responsable de la lenta convergencia de la energía de ligadura en el método COSM.

El principio de Pauli se trata aproximadamente imponiendo que la función de onda del nucleón de valencia sea ortogonal a la función de onda del nucleón del core.

- Método de la función de Green de dos partículas (Two-particle Green's Function Method, GFM).

  Para estudiar los efectos de apareamiento en sistemas débilmente ligados, en particular el núcleo ^{11}Li, se propuso [42] usar un modelo de hamiltoniano de tres cuerpos con una interacción entre los neutrones de valencia que contiene un término dependiente de la densidad. La densidad se toma tal que se fije el apareamiento empírico de los núcleos ^{14}C y ^{12}Be (ya que contienen el mismo número de neutrones que ^{11}Li). La interacción entre los neutrones de valencia y el core se toma como un potencial de Woods-Saxon.

  El método numérico usado para resolverlo es el método de la función de Green de dos partículas en el espacio de coordenadas. El principio de Pauli está contenido en la densidad de la interacción *nn* y los estados ligados ocupados se excluyen de la función de onda. Sin embargo, el modelo contiene algunas aproximaciones que pueden afectar al resultado final. El modelo ignora los efectos de rango finito en las interacciones de apareamiento y omite el término de mezcla $\nabla_{1c} \cdot \nabla_{2c}$ en el operador energía cinética de tres cuerpos.

- Aproximaciones variacionales (Variational Approaches, VA).

  Principalmente, hay dos métodos que se clasifican como VA. En el primero [43] se ha estudiado ^{11}Li mientras que en el segundo [44] se han tratado los sistemas $A = 6$.

  En la referencia [43] la función de onda de tres cuerpos se desarrolla en términos de funciones de onda de oscilador armónico expresadas en coordenadas de Jacobi. Los parámetros de escala del oscilador se tratan como parámetros variacionales junto con los coeficientes del desarrollo. Tanto los potenciales neutrón-neutrón como neutrón-core se eligen puramente centrales. El principio de Pauli se introduce usando un potencial neutrón-core

poco profundo que no tiene estados ligados.

En la referencia [44] la función de onda de tres cuerpos se obtiene resolviendo un conjunto de ecuaciones integrales Hill-Wheeler en dos dimensiones en la cuadratura de Chebyshev. Como base se toma una base gaussiana que no es ortogonal. El principio de Pauli se introduce mediante un proyector sobre los estados prohibidos. Este proyector se introduce en el hamiltoniano y va multiplicado por una constante que debería ir a infinito para excluir estos estados prohibidos por Pauli.

- Método de ecuaciones integrales (Integral Equations, IE).

  En el método IE [45] las funciones de onda de tres cuerpos se construyen resolviendo la ecuación de Schrödinger en el espacio de momentos con las coordenadas de Jacobi. Esto lleva a un conjunto de ecuaciones integrales acopladas. El principio de Pauli se trata de dos modos, bien con un core repulsivo en la interacción $\alpha + n$ o con un potencial profundo $\alpha + n$ con estado prohibido.

Hasta aquí se han presentado brevemente diversos métodos utilizados para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos. En cada uno de ellos se ha mencionado brevemente como se trata el principio de exclusión de Pauli. Pero éste es un tema de especial importancia en el tratamiento de sistemas de tres cuerpos por lo que conviene desarrollarlo más ampliamente.

1.2.2. Tratamiento del principio de Pauli

Como ya se ha comentado, un aspecto importante del problema de tres cuerpos es el tratamiento del principio de Pauli entre los nucleones del halo y los del core. La introducción directa del principio de Pauli lleva a interacciones no locales entre los grupos de nucleones. Se han sugerido diferentes aproximaciones al problema de la antisimetrización. En el límite donde la interacción entre los nucleones de valencia es despreciable, la antisimetría, dentro del modelo de capas, se consigue construyendo determinantes de Slater de las órbitas relevantes. Pero cuando las interacciones residuales nn se tienen en cuenta la situación se complica debido a que hay mezcla de configuraciones. Éste es un efecto pequeño que sólo es apreciable en las proximidades de la superficie de Fermi. Por ello,

se emplean dos posibles aproximaciones: una es despreciar el principio de Pauli para sistemas muy débilmente ligados en los que la mezcla de configuraciones es pequeña y la otra alternativa es reemplazar el principio de Pauli con la exclusión de algunos estados ocupados del espacio accesible a las partículas de valencia. Por lo tanto, si se quiere tratar un núcleo con A nucleones como un sistema de tres cuerpos con un potencial efectivo core+n y tener en cuenta los efectos del principio de Pauli, existen algunas alternativas. Thompson et al. [46] hacen una revisión de las diferentes aproximaciones que se han propuesto para introducir el principio de Pauli en un problema de tres cuerpos y presentan cómo se modifican los resultados en función de la aproximación elegida. La discusión se centra en el caso de sistemas con halo de dos neutrones.

En primer lugar, la elección de las coordenadas de Jacobi simplifica la antisimetrización de las funciones de onda entre los dos nucleones de valencia: cuando se construyen los canales en esta base, la antisimetrización entre ellos puede ser incluida imponiendo que $\{l_x + S_x + T_x\}$ sea impar, donde $T_x = 1$ es el isospín del subsistema de dos neutrones de valencia. Utilizando el método del desarrollo en HH para la búsqueda del estado ligado y de los estados del continuo, se tiene que las funciones de onda hiperradiales $U^{lS_xj}_{Kl_xl_y}(\rho)$ satisfacen las condiciones de contorno siguientes para la energía ε de tres cuerpos:

- para el estado ligado

$$U^j_{K\gamma}(0) = 0,\ U^j_{K\gamma}(\rho \to \infty) \sim \exp(-\kappa\rho), \tag{1.10}$$

- para los estados de dispersión

$$U^j_{K\gamma}(\rho) \sim H^-_{K+3/2}(\kappa\rho)\delta_{K\gamma,K_0\gamma_0} - S^j_{K\gamma,K_0\gamma_0}H^+_{K+3/2}(\kappa\rho), \tag{1.11}$$

  donde H^- y H^+ son las funciones de Hankel entrante y saliente, $\gamma \equiv \{l_x, l_y, l, S_x\}$, $\kappa = \sqrt{2m|\varepsilon|/\hbar^2}$, m es la masa arbitraria de normalización que se toma como la masa del nucleón y $S^j_{K\gamma,K_0\gamma_0}$ es la matriz de dispersión con las condiciones iniciales (K_0, γ_0).

Los sistemas borromeos satisfacen estas, particularmente simples, condiciones de contorno ya que no existen estados ligados de dos cuerpos asintóticamente.

Las interacciones de acoplamiento de ondas parciales son los elementos de matriz

$$V^j_{K'\gamma',K\gamma}(\rho) = \langle K\gamma j\mu|\widehat{V}_{12} + \widehat{V}_{13} + \widehat{V}_{23} + \widehat{V}_{123}|K'\gamma' j\mu\rangle \tag{1.12}$$

donde el ket $|K\gamma j\mu\rangle$ denota la función $\mathcal{Y}^{j\mu}_{K\gamma}(\Omega) = [\Upsilon^{l_x l_y}_{Kl}(\Omega) \otimes \chi_{S_x}]_{j\mu}$, V_{ij} es la interacción entre dos cuerpos y V_{123} es una posible fuerza de tres cuerpos. La función de onda será solución de la ecuación de Schrödinger de tres cuerpos

$$(\widehat{T} + \widehat{V}_{12} + \widehat{V}_{13} + \widehat{V}_{23} + \widehat{V}_{123} - \varepsilon)\psi_{j\mu} = 0. \tag{1.13}$$

Después de proyectar sobre la parte hiperangular, angular y de espín de la función de onda, se obtiene el conjunto de ecuaciones acopladas

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mathcal{L}(\mathcal{L}+1)}{\rho^2}\right] - \varepsilon\right) U^j_{K\gamma}(\rho) + \sum_{K'\gamma'} V^j_{K'\gamma',K\gamma}(\rho) U^j_{K'\gamma'}(\rho) = 0, \tag{1.14}$$

donde $\mathcal{L} = K + 3/2$. Sin embargo este sistema de ecuaciones acopladas no tiene en cuenta el bloqueo de Pauli. De manera que hay que considerar todavía los efectos de la antisimetrización, la existencia de estados prohibidos en el movimiento grupo-grupo y la posibilidad de una dependencia de las interacciones en el momento angular relativo de las partículas interactuantes.

La antisimetrización de la función de onda de A cuerpos lleva a términos de intercambio que son no locales en las coordenadas relativas grupo-grupo y estas no localidades conducen a una dependencia en el momento angular relativo de los potenciales locales de fase equivalente. Por lo tanto, se pueden usar diferentes profundidades de potencial en diferentes ondas parciales. En cualquier caso, esto es con frecuencia necesario cuando los potenciales locales se ajustan a los corrimientos de fase experimentales para las dispersiones binarias. Incluso cuando se reproducen los estados ligados y de dispersión de dos cuerpos, la situación de tres cuerpos requiere la consideración del principio de Pauli otra vez. Esto se debe a que las interacciones tienen típicamente autoestados de energía negativa que se deben considerar como ya ocupados en uno de los constituyentes compuestos. El caso de tres cuerpos requiere algún tratamiento de antisimetrización, por lo menos un bloqueo de Pauli que prohíba a los neutrones de valencia entrar en los estados ocupados del core. Existen diferentes aproximaciones:

- Operadores de proyección: proyecta los estados binarios ya ocupados fuera del subespacio permitido; esta proyección puede ser hecha con el método del pseudopotencial [47] o directamente por medio de operadores de proyección [40].

- Transformación supersimétrica: usa una transformación supersimétrica [48] del potencial n+core; para el potencial que tiene un estado prohibido se puede obtener un potencial espectralmente equivalente sin este estado.

- Potencial de fase equivalente: como los corrimientos de fase están definidos en un rango finito de energía, es posible introducir una interacción repulsiva auxiliar en las mismas componentes parciales de las interacciones efectivas entre grupos de nucleones donde se esperan estados prohibidos y fijar estas interacciones a los corrimientos de fase experimental.

- Proyección adiabática: usa un potencial n+core realista, que liga al nucleón en un estado prohibido por Pauli, pero posteriormente el potencial adiabático asociado a este estado prohibido se deja fuera a la hora de resolver la parte hiperradial [49]; en el método de la aproximación adiabática se resuelve primero la parte angular cuyos autovalores son los potenciales efectivos que entran en la parte hiperradial.

Los métodos de operadores de proyección y proyección adiabática construyen operadores de proyección, locales en ρ en el caso de la proyección adiabática, para eliminar las soluciones que no se quieren. Los métodos de la transformación supersimétrica y del potencial de fase equivalente se han comparado para los estados ligados de ^{6}Li [50] y ^{6}He [14]. Los métodos de operadores de proyección y de la transformación supersimétrica se han comparado para ^{6}He, ^{11}Li y ^{14}Be [48].

Considerando el núcleo ^{6}He, las distribuciones $dB(E1)/d\varepsilon$ son iguales para los métodos de la transformación supersimétrica y del potencial de fase equivalente y para los métodos de operadores de proyección y proyección adiabática, pero entre ellas son significativamente diferentes. Recientemente [51] se han obtenido distribuciones $dB(E1)/d\varepsilon$ para ^{6}He en GSI mediante estudios de ruptura de ^{6}He por un blanco pesado. Aunque los errores son bastante grandes, los números experimentales están más cerca de la predicción obtenida usando el método de proyección [52] que usando el método de potenciales repulsivos para ondas s [53].

En este apartado se han presentado los diversos métodos desarrollados para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos, como son los núcleos borromeos. También se han comentado los diversos procedimientos existentes para el tratamiento del principio de Pauli, que es un aspecto importante en tales sistemas.

1.3. Tratamiento del continuo

En este apartado se va a tratar el problema del continuo en un sistema mecano-cuántico. En general, un hamiltoniano mecano-cuántico independiente del tiempo presenta autoestados ligados y no ligados. Normalmente, el número de autoestados ligados es finito y sus energías son discretas mientras que el número de autoestados no ligados es infinito y sus energías forman un continuo. Por lo tanto, un cálculo de las propiedades del sistema en términos de las autofunciones del hamiltoniano incluye una suma sobre los estados discretos y una integración sobre los estados del continuo. Ésta es una tarea complicada ya que las funciones de onda del continuo tienen un rango infinito y no son normalizables. Por ello, normalmente, las propiedades de los sistemas ligados se analizan usando sólo los autoestados discretos mientras que los del continuo sólo son relevantes para los procesos de dispersión. Sin embargo, el estudio del efecto de la parte continua del espectro para tratar propiedades de los sistemas ligados tiene una larga tradición en física y, de la misma manera, el efecto de los estados ligados en los procesos de dispersión se ha investigado ampliamente. Ejemplos recientes se pueden encontrar en física nuclear [54–59], molecular [60–62] y atómica [63–66]. En particular en física nuclear, como ya se ha comentado, el uso de instalaciones de haces radiactivos ha puesto de manifiesto una gran cantidad de problemas nuevos en estructura nuclear [67]. Éstos incluyen el halo nuclear y los núcleos ricos en neutrones y protones cerca de las líneas de evaporación respectivas. Ellos son ejemplos de sistemas débilmente ligados para cuya descripción no basta la consideración únicamente de los estados ligados sino que requiere la inclusión, de algún modo, de la parte continua del espectro. Para ello, es necesario usar algún procedimiento de discretización que sustituya el continuo por un número finito de estados normalizables que, en el límite adecuado, deberán representar el efecto del continuo verdadero.

1.3.1. Métodos de discretización

En la literatura existen diferentes métodos de discretización que se han usado en física nuclear, molecular y atómica, cada uno con sus ventajas e inconvenientes. El método de los estados de Gamow [68, 69] hace uso de las soluciones no normalizables de la ecuación de Schrödinger con condiciones de contorno salientes

que corresponden a energías complejas con parte real positiva y que se denominan resonancias. Como estas soluciones son divergentes es necesario aplicar un procedimiento de regularización. En la misma línea, el método de los estados de Siegert [70] hace uso de todas las soluciones de la ecuación de Schrödinger con condiciones de contorno salientes. Mientras que los estados de Gamow no son una base completa, los estados de Siegert, una vez regularizados, sí lo son. El método del pseudoestado de Siegert [71, 72] tiene como idea básica generar una base discreta resolviendo la ecuación de Schrödinger con condiciones de contorno salientes pero en una caja. En esta base, los autoestados con energías estables respecto al cambio en el radio de la caja representan estados ligados o resonancias mientras que aquéllos cuyas energías varían con el radio sirven para representar el resto de los estados del continuo. El método de la matriz R [73–75] también genera una base discreta resolviendo la ecuación de Schrödinger en una caja pero imponiendo como condición de contorno que la derivada logarítmica de las funciones de onda sea una misma constante para todas, garantizándose así su ortogonalidad. En esta base, los autoestados con energías negativas están próximos a los estados ligados mientras que los de energía positiva representan el continuo. Estos dos últimos métodos proporcionan bases completas dentro del espacio definido por la caja. Para verificar la convergencia en ambos se necesitan modificar dos parámetros, el radio de la caja y la energía máxima considerada.

El método de la base sturmiana [76–78] se define como un conjunto de soluciones de la ecuación de Schrödinger de un potencial fácilmente resoluble, donde, para cada solución del conjunto, el potencial se escala con un factor elegido de tal manera que todas las soluciones correspondan a la misma energía. Se puede demostrar que estos estados son ortogonales cuando se pesan con los mismos potenciales. Esta base es completa dentro del rango del potencial, por lo que la convergencia es buena para operadores de rango corto, con un rango similar al potencial, mientras que no es adecuada para describir la parte del continuo de baja energía, que puede ser muy importante para los sistemas débilmente ligados. El método de discretización del continuo que se utiliza en los cálculos de canales acoplados discretizados en el continuo (Continuum Discretized Coupled Channels, CDCC) [79], que se describe con más detalle en el apartado 1.5, consiste en promediar la función de onda del continuo en intervalos fijos de valores del momento asintótico, k, en el continuo de momento o energía, que se denominan

bins, produciendo funciones de onda normalizables. En este método, para estudiar la convergencia también hay que modificar dos parámetros, la anchura de los *bins* y el momento máximo considerado. Además, es necesario conocer las funciones de onda del continuo real para construir los *bins*. Por ello, existen diversos métodos que utilizan una base de cuadrado integrable [80–83] y diagonalizan el hamiltoniano del sistema en dicha base. Entre ellos, en el método del oscilador armónico (Harmonic Oscillator, HO) [84] se trata simplemente de utilizar como base discreta la base HO. Este método hace uso de una de las herramientas más importantes de la física nuclear, el oscilador armónico. Las funciones de onda del HO forman un conjunto discreto y completo que sirve como base monoparticular. El inconveniente es su comportamiento asintótico gaussiano que no coincide con el comportamiento asintótico de las funciones de onda de los sistemas con potenciales de interacción de rango finito. Éste es un problema serio para sistemas débilmente ligados por lo que la base HO no es adecuada en estos casos. Sería deseable entonces una nueva base que conservara las ventajas del HO y que mejorara el comportamiento asintótico. De esta forma se puede considerar una base obtenida a través de la aplicación de una transformación local de escala (Local-Scaling point Transformation, LST) a la base HO y denominada por ello base del oscilador armónico transformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO). Esta aproximación, originalmente desarrollada por Petkov y Stoitsov [85–90], ha atraído una considerable atención recientemente [54–56], proponiéndose como condición para obtener la LST que se reproduzca la densidad nuclear local a pequeñas y grandes distancias, ya que ellos aplican el método para obtener funciones de onda monoparticulares.

Más recientemente nuestro grupo ha desarrollado el método THO [91–94] proponiendo una nueva condición para la obtención de la LST. Esta condición consiste en imponer que el estado fundamental ligado del sistema se transforme en el estado fundamental del HO. Nuestro método no tiene en cuenta explícitamente la estructura del continuo en el proceso de discretización, por lo que la única información que se requiere para construir la base THO, e incluso para evaluar los elementos de matriz del hamiltoniano, es la función de onda del estado fundamental del sistema. En lo sucesivo cuando se haga referencia al método THO se tratará de esta opción. Por este camino, nuestro grupo ha avanzado proponiendo una generalización del método THO [95], que no está relacionada necesariamente

con el HO. Este método más general consiste en generar una base completa y discreta de estados ortonormales cuyas funciones de onda se construyan haciendo uso de una familia de polinomios ortogonales (Orthogonal Polynomial, OP), siendo su función peso el cuadrado de la función de onda del estado fundamental expresada en términos de una variable convenientemente escalada, es decir, realizando una LST adecuada.

Estos métodos basados en familias de polinomios ortogonales nos proporcionan una base completa, discreta y normalizable de estados que describen tanto los estados ligados como el continuo de energía, reproduciendo exactamente el comportamiento del estado fundamental. Para ello, sólo se necesita conocer, analítica o numéricamente, la función de onda del estado fundamental del sistema, es decir, no se necesita resolver la ecuación de Schrödinger para todo el espectro de energía. Las bases son tales que el estado con $n = 0$ coincide con el estado fundamental del sistema estudiado y los estados con $n > 0$ describen el continuo, u otros estados ligados si existieran. Debe quedar claro que las bases así obtenidas no están formadas por autoestados del hamiltoniano del sistema, sino que una vez obtenidas, se diagonaliza en ellas el hamiltoniano y los autovalores y autofunciones calculados se toman como representativos del espectro de energía. En los artículos [91–95] se ha mostrado que el método OP describe correctamente la parte no resonante del continuo cerca del límite de disociación. Una descripción detallada de este método se presenta el apartado 1.4.

1.3.2. Continuo resonante

Aparte de los problemas mencionados, asociados a la consideración de la parte continua del espectro, ciertos potenciales presentan otra dificultad añadida como es la existencia de resonancias. Estas se ponen de manifiesto, por ejemplo, en los procesos de dispersión y cualquier método de discretización del continuo debería reproducirlas adecuadamente. La definición de resonancia o estado resonante se puede hacer de diferentes formas. Matemáticamente, un estado resonante es un estado discreto solución de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo correspondiente a condiciones de contorno salientes y caracterizado por una energía compleja, con parte real positiva y parte imaginaria negativa. Por lo tanto es un estado no estacionario, es decir, es un estado que, aunque puede tener larga vida, acaba decayendo en el tiempo. Por otra parte, su función de onda diverge

a distancias grandes por lo que no pertenece al espacio de Hilbert (espacio de funciones de cuadrado integrable) del sistema y no es, por tanto, autofunción de la energía ya que de hecho no es un estado estacionario. Las resonancias pueden ser identificadas como las funciones de onda cuyo valor del momento es uno de los polos de la matriz de dispersión o matriz S, $S(k)$, que están en el sector comprendido entre el eje de momento real positivo y la bisección del cuarto cuadrante. Normalmente, se denomina energía de la resonancia a su parte real y el doble del valor absoluto de la parte imaginaria se interpreta como la anchura de la misma. Físicamente, un estado resonante se forma, por ejemplo, cuando la partícula es capturada por efecto túnel en la región fuertemente atractiva del potencial y de nuevo por efecto túnel la partícula puede dejar esta región del potencial, por lo que es un fenómeno cuántico que no se tiene en cuenta en la física clásica. El carácter resonante se pone de manifiesto en las funciones de onda del continuo real que tienen una energía próxima a la energía de la resonancia, ya que estas tienen una probabilidad mayor de estar en el rango del potencial. Por ello, estos estados del continuo resonante juegan un papel más relevante que los del continuo no resonante a la hora de evaluar acoplamientos con el estado fundamental.

Sobre este tema, se pueden encontrar estudios recientes [59, 80, 96, 97] en los que se intenta identificar la presencia de resonancias por medio del cálculo de diversas magnitudes. También es relevante mencionar en este punto el método del escalado complejo (Complex Scaling Method, CSM), introducido en los años 70 [98], en el cual las coordenadas radiales se rotan dentro del plano complejo un ángulo θ ($r \rightarrow re^{i\theta}$). Cuando este ángulo es más grande que el argumento de la resonancia entonces la función de onda divergente correspondiente a la resonancia se hace convergente, permitiendo así su identificación. Los detalles de este método y su aplicación a colisiones atómicas se encuentra en la referencia [99]. Aplicaciones recientes se encuentran en las referencias [100–104]. Pero la cuestión que aquí se plantea es describir adecuadamente la estructura del continuo tanto resonante como no resonante con un determinado método de discretización y por ese camino ser capaz de asignar a los estados resonantes una función de onda normalizable. Ya en un trabajo más antiguo [105] se hace un primer intento de asignar una función de onda normalizable como representativa de un estado resonante; este método consiste en diagonalizar el hamiltoniano del sistema en una base discreta, eligiendo la más apropiada en función del sistema correspondiente,

y tomar como estados representativos de las resonancias aquellos autoestados del hamiltoniano que presentan un autovalor estable conforme se aumenta el tamaño de la base. Este método sólo es válido, bajo ciertas condiciones restrictivas, para resonancias estrechas, es decir, para aquéllas cuya anchura es pequeña. Por lo tanto, es necesario ir más allá y encontrar un método más general que permita estudiar un potencial cuyas resonancias sean anchas. Éste es uno de los objetos del presente trabajo.

Para el desarrollo del mismo, se usará el potencial de Ginocchio [106,107] que es un potencial parametrizado, es decir, una familia de potenciales cuya correspondiente ecuación de Schrödinger es resoluble analíticamente. Se da en términos de una función especial que es una generalización de la tangente hiperbólica y que es básicamente la inversa de la integral elíptica de tercera clase. Dentro del rango de formas posibles del potencial de Ginocchio, hay potenciales que se parecen a la aproximación local de campo medio para el núcleo atómico. Esta clase de potenciales se ha utilizado en estudios de núcleos [59,108], incluidos los débilmente ligados, por ser lo suficientemente flexible para describir los diferentes regímenes nucleares. También se ha utilizado en mecánica cuántica supersimétrica para estudiar potenciales compañeros que presenten estados resonantes [109].

El potencial de Ginocchio unidimensional [106] es finito en el origen y tiende a cero en el infinito, es simétrico respecto al origen y está caracterizado por dos parámetros, uno relacionado con la profundidad del potencial y otro con la forma. Pertenece a una clase más amplia de potenciales propuesta por Natanzon [110,111], la cual es función de cinco parámetros. El potencial de Ginocchio tridimensional [107] es un potencial esférico que generaliza el caso unidimensional para incluir ondas parciales mayores. Para ello se introduce en conjunción un potencial dependiente del momento angular, el cual introduce un parámetro centrífugo. Además se generaliza la ecuación de Schrödinger incluyendo una masa efectiva que depende de la coordenada radial y que introduce otro parámetro adicional, con lo cual, en conjunto el potencial depende de cuatro parámetros. Al igual que en el caso unidimensional tiende a cero en el infinito y en el origen se puede elegir de manera que sea finito o no, según interese. El potencial de Ginocchio engloba como un caso particular el potencial de Pöschl-Teller [112] que no presenta resonancias mientras que para ciertos valores de los parámetros da lugar a potenciales que presentan resonancias.

En este apartado se ha discutido el problema del continuo que presenta un sistema mecano-cuántico general. Se ha hecho un resumen de los diferentes métodos de discretización que se han desarrollado para el tratamiento del mismo. Se ha explicado el caso particular en el cual el continuo presenta resonancias y se ha introducido un potencial, el potencial de Ginocchio, que presenta resonancias y que será utilizado posteriormente en este trabajo como ejemplo.

1.4. Método de polinomios ortogonales (OP)

En esta memoria se propone un método de discretización basado en polinomios ortogonales (Orthogonal Polynomial, OP) [91,92,95]. Como se trata de un método relativamente nuevo, en este apartado se presentan las características principales utilizando como ejemplo el caso de 1 dimensión (1D).

El hamiltoniano de un sistema en 1D expresado en unidades adimensionales es

$$\widehat{h} = -\frac{1}{2}\frac{d^2}{dx^2} + v(x), \tag{1.15}$$

donde $x = \alpha r$ siendo r la coordenada física y $\widehat{h} = \widehat{H}\mu/\hbar^2\alpha^2$ siendo H el hamiltoniano y μ la masa reducida del sistema. El punto de partida es el conocimiento de la función de onda del estado fundamental ligado del sistema $\psi_B(x)$, ya sea analítica o numéricamente,

$$\widehat{h}\psi_B(x) = \varepsilon_B\psi_B(x), \tag{1.16}$$

donde ε_B es la energía del estado fundamental.

La idea es generar una base completa y discreta de estados cuyas de funciones de onda, $\psi_n(x)$, sean normalizables y cumplan la relación de ortonormalidad

$$\int_a^b dx\ \psi_n(x)^*\psi_m(x) = \delta_{nm} \qquad \forall n, m, \tag{1.17}$$

donde $[a, b]$ es el intervalo donde está definido el potencial $v(x)$. Esta base se puede obtener expresando cada función de onda $\psi_n(x)$ como producto de la función de onda del estado fundamental $\psi_B(x)$ del sistema por un polinomio de orden n en una variable $s(x)$, que sea continua, monovaluda y monótona, y por la constante de normalización correspondiente

$$\psi_n(x) = N_n\psi_B(x)P_n(s(x)). \tag{1.18}$$

De esta manera la condición de ortonormalidad (1.17), expresada en la variable s, queda

$$N_n^* N_m \int_{s(a)}^{s(b)} ds \frac{dx}{ds} |\psi_B(x(s))|^2 P_n(s)^* P_m(s) = \delta_{nm} \qquad \forall n, m, \tag{1.19}$$

donde

$$\int_{s(a)}^{s(b)} ds \frac{dx}{ds} |\psi_B(x(s))|^2 P_n(s)^* P_m(s) = 0 \qquad n \neq m \tag{1.20}$$

es la condición de ortogonalidad de la familia de polinomios[2] $(P_n)_n$ considerada respecto a la medida

$$d\mu(s) = ds \frac{dx}{ds} |\psi_B(x(s))|^2 \tag{1.21}$$

definida de tal modo que

$$\int_{s(a)}^{s(b)} d\mu(s) = 1. \tag{1.22}$$

Por otra parte

$$|N_n|^2 \int_{s(a)}^{s(b)} ds \frac{dx}{ds} |\psi_B(x(s))|^2 |P_n(s)|^2 = 1 \qquad \forall n \tag{1.23}$$

es la condición de normalización de la función de onda $\psi_n(x)$.

A partir de esta idea hay dos posibilidades:

1. Fijar la familia de polinomios ortogonales $(P_n)_n$ y determinar la transformación $s(x)$.

2. Fijar la transformación $s(x)$ y obtener la familia de polinomios ortogonales $(P_n)_n$ correspondiente.

El método del oscilador armónico transformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO) es un ejemplo de la primera posibilidad, fijándose como familia de polinomios ortogonales la asociada a las funciones de onda del oscilador armónico (Harmonic Oscillator, HO). Por otro lado, la generación de una familia de polinomios ortogonales en la variable trivial (Trivial Orthogonal Polynomial, TOP) es un ejemplo de la segunda posibilidad, fijándose la transformación $s(x)$ a la variable trivial del sistema, $s(x) = x$.

En ambos casos, una vez obtenida la base $(\psi_n)_n$, si se toma una base finita con $N+1$ estados, donde N es el número de estados excitados, se puede diagonalizar en

[2] $(P_n)_n \equiv \{P_n, n = 0, \ldots, \infty\}$

ella el hamiltoniano del sistema y tomar los autovalores y autofunciones obtenidos como representativos tanto del continuo como de los estados ligados. Para calcular los elementos de matriz del hamiltoniano se tiene la expresión

$$\langle\psi_n|(\widehat{h}-\varepsilon_B)|\psi_m\rangle = \frac{N_n^* N_m}{2}\int_a^b dx|\psi_B(x)|^2\frac{dP_n^*(s(x))}{dx}\frac{dP_m(s(x))}{dx}. \tag{1.24}$$

Para obtener (1.24), se ha tenido en cuenta la relación

$$\begin{aligned}&\langle\psi_n|(\widehat{h}-\varepsilon_B)|\psi_m\rangle = \\ &= \frac{N_n^* N_m}{2}\int_a^b dx\ \psi_B(x)^*\left[P_n^*(s(x)),[(\widehat{h}-\varepsilon_B),P_m(s(x))]\right]\psi_B(x)\end{aligned} \tag{1.25}$$

y, cuando el potencial $v(x)$ es local, la relación

$$\left[P_n^*(s(x)),[(\widehat{h}-\varepsilon_B),P_m(s(x))]\right] = \frac{dP_n^*(s(x))}{dx}\frac{dP_m(s(x))}{dx}. \tag{1.26}$$

En el método THO se fija como familia de polinomios ortogonales la relacionada con la base HO en 1D. Dicha base es la siguiente

$$\phi_n^{HO}(s) = C_n H_n(s)\exp(-s^2/2), \tag{1.27}$$

donde $(H_n)_n$ es la familia de los polinomios de Hermite y C_n es la constante de normalización

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}2^n n!}}. \tag{1.28}$$

Aunque es útil definir la base y la constante de normalización como

$$\phi_n^{HO}(s) = N_n\phi_0^{HO}(s)H_n(s), \tag{1.29}$$

$$N_n = \frac{C_n}{C_0} = \frac{1}{\sqrt{2^n n!}}. \tag{1.30}$$

Esta familia es ortogonal respecto a la medida

$$d\mu(s) = ds\frac{1}{\sqrt{\pi}}\exp(-s^2) = ds|\phi_0^{HO}(s)|^2. \tag{1.31}$$

De esta manera, teniendo en cuenta la expresión (1.21) de la medida, se tiene la relación

$$dx|\psi_B(x)|^2 = ds|\phi_0^{HO}(s)|^2, \tag{1.32}$$

la cual permitirá obtener la transformación local de escala (Local-Scaling point Transformation, LST), $s(x)$. De aquí se deduce que este método se puede interpretar como aquél que transforma el estado fundamental del sistema, en la

variable física x, en el estado fundamental de un oscilador armónico simple, en una variable s. La ecuación que permite calcular la LST, $s(x)$, es

$$\int_a^x dx'|\psi_B(x')|^2 = \int_{-\infty}^s ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2. \tag{1.33}$$

Una vez obtenida la LST, la base THO se obtiene aplicando dicha transformación $s(x)$ a la base HO, obteniéndose

$$\begin{aligned}\psi_n^{THO}(x) &= \sqrt{\frac{ds}{dx}}\phi_n^{HO}(s(x)) \\ &= N_n\sqrt{\frac{ds}{dx}}\phi_0^{HO}(s(x))H_n(s(x)) = N_n\psi_B(x)H_n(s(x)).\end{aligned} \tag{1.34}$$

Como se puede observar sólo se ha necesitado conocer la función de onda del estado fundamental del sistema para obtener la LST, $s(x)$, y por tanto la base buscada.

En el método TOP se fija la LST, $s(x)$, al caso concreto más simple $s(x) = x$ y se genera la familia de polinomios ortogonales respecto a la medida dada, según la ecuación (1.21), por

$$d\mu(x) = dx|\psi_B(x)|^2, \tag{1.35}$$

es decir, que tiene como función peso el cuadrado de la función de onda del estado fundamental del sistema considerado. Esta familia de polinomios ortogonales no será en general una de las clásicas porque su función peso no coincidirá normalmente con las funciones peso de las familias clásicas. En este caso la condición de ortogonalidad de la familia de polinomios, dada por la ecuación (1.20), queda

$$\int_a^b dx|\psi_B(x)|^2 P_n^{TOP}(x)^* P_m^{TOP}(x) = 0 \qquad n \neq m, \tag{1.36}$$

la cual permitirá obtener la familia de polinomios ortogonales. Como los polinomios se pueden expresar de la forma

$$P_n^{TOP}(x) = \sum_{p=0}^{n} C_{np}x^p, \tag{1.37}$$

lo más sencillo es obtener los polinomios mónicos, es decir, aquéllos que cumplen $C_{nn} = 1\ \forall n$. De esta manera, para cada polinomio de orden n se obtiene el resto de n coeficientes, que serán reales, con las n ecuaciones que se tienen a partir de

la condición de ortogonalidad (1.36) respecto a los polinomios de orden $m < n$ de la forma siguiente

$$\sum_{p=0}^{n-1}\sum_{l=0}^{m-1} C_{np}C_{ml}\langle x^{p+l}\rangle + \sum_{l=0}^{m-1} C_{ml}\langle x^{n+l}\rangle + \sum_{p=0}^{n-1} C_{np}\langle x^{p+m}\rangle + \langle x^{n+m}\rangle = 0, \quad (1.38)$$

donde $\langle x^p\rangle$ es el momento de x de orden p

$$\langle x^p\rangle = \int_a^b d\mu(x)x^p. \quad (1.39)$$

Así para cada n se tiene $m = 0,\ldots,n-1$, por lo tanto, n ecuaciones con n incógnitas $\{C_{np}, p = 0,\ldots,n-1\}$ ya que los coeficientes $\{C_{ml}, l = 0,\ldots,m-1, m = 0\ldots,n-1\}$ se han determinado con anterioridad. Los primeros polinomios resultan

$$P_0^{TOP}(x) = 1, \quad (1.40)$$

$$P_1^{TOP}(x) = x - \langle x\rangle, \quad (1.41)$$

$$P_2^{TOP}(x) = x^2 + \frac{\langle x\rangle\langle x^2\rangle - \langle x^3\rangle}{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}x - \frac{\langle x^2\rangle^2 - \langle x\rangle\langle x^3\rangle}{\langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2}. \quad (1.42)$$

Una vez obtenida la familia de polinomios ortogonales, la base TOP se obtiene como

$$\psi_n^{TOP}(x) = M_n\psi_B(x)P_n^{TOP}(x), \quad (1.43)$$

donde M_n es la constante de normalización que se calcula con la condición de normalización (1.23), que en este caso queda

$$|M_n|^2\int_{s(a)}^{s(b)} dx|\psi_B(x)|^2|P_n^{TOP}(x)|^2 = 1 \qquad \forall n. \quad (1.44)$$

Como se puede observar, igual que en el método THO, sólo se necesita conocer la función de onda del estado fundamental para obtener los coeficientes de los polinomios y, por tanto, la base buscada.

Las ventajas que estos métodos OP presentan respecto a otros métodos de discretización son las siguientes:

- Son bases discretas, completas y ortonormales por estar expresadas en función de una familia de polinomios ortogonales, clásica o no.
- Para generar la base sólo se necesita conocer, analítica o numéricamente, la función de onda del estado fundamental del sistema.

- Las bases son tales que el estado con $n = 0$ coincide con el estado fundamental del sistema estudiado y los estados con $n > 0$ describen el continuo u otros estados ligados si existieran.

- La base generada guarda información del sistema, a través de la función de onda del estado fundamental. Si se diagonaliza el hamiltoniano en una base finita con N estados excitados, se espera que los resultados converjan rápidamente conforme aumenta N. Si N tendiera a infinito se tendrían los resultados exactos.

Como ejemplo se van a aplicar los dos métodos anteriores al potencial de Pöschl-Teller [112] en 1D, el cual se suele utilizar para modelar algunos tipos de vibraciones moleculares. La expresión del potencial es

$$v(x) = -\frac{\nu(\nu+1)}{2(\cosh(x))^2} \; ; \qquad -\infty < x < \infty. \tag{1.45}$$

Si se elige $\nu = 1$ se tiene un único estado ligado, que es el estado fundamental, cuya función de onda es

$$\psi_B(x) = \frac{1}{\sqrt{2}\cosh(x)} \tag{1.46}$$

y su energía es $\varepsilon_B = -\frac{1}{2}$. En la figura 1.3 se presenta el potencial para $\nu = 1$.

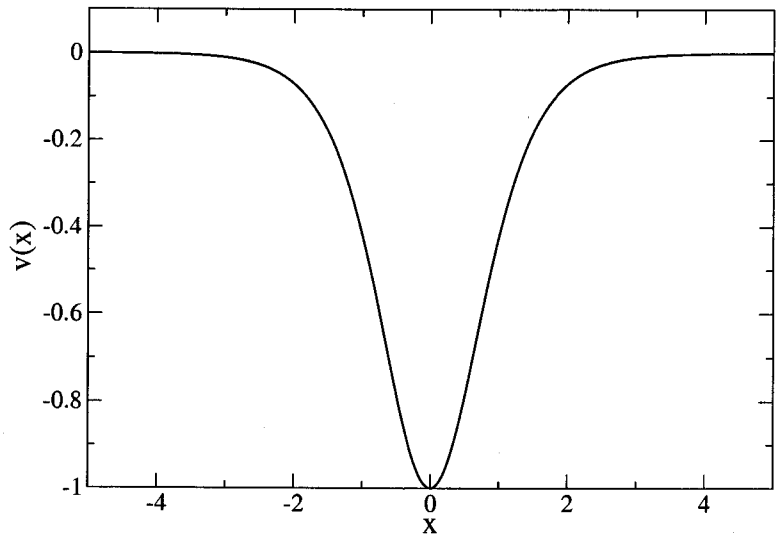


Figura 1.3: *Potencial de Pöschl-Teller para* $\nu = 1$.

Para el método THO, si se impone la condición de igualdad, según la ecuación (1.33), entre las funciones de onda del estado fundamental del potencial del Pöschl-Teller y del HO, se calcula la LST, $s(x)$, según

$$\int_{-\infty}^{x} dx'|\psi_B(x')|^2 = \int_{-\infty}^{s} ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2. \tag{1.47}$$

Pero como ambas funciones de onda son pares se tiene

$$\int_{0}^{x} dx'|\psi_B(x')|^2 = \int_{0}^{s} ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2, \tag{1.48}$$

obteniéndose

$$\tanh(x) = \mathrm{erf}(s), \tag{1.49}$$

donde $\mathrm{erf}(s)$ es la función error de s. En la figura 1.4 se presenta la función $s(x)$ que se obtiene. Se puede observar cómo cerca del origen el comportamiento es aproximadamente lineal y para valores grandes de x el comportamiento es aproximadamente cuadrático.

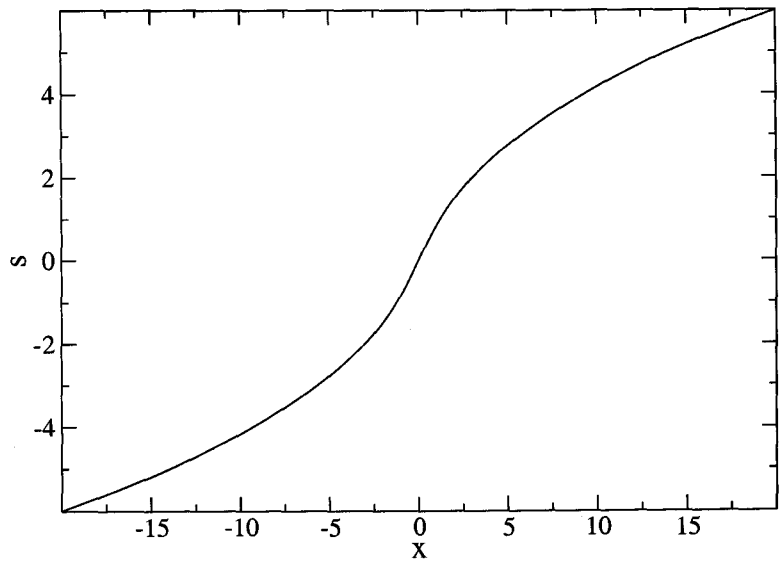


Figura 1.4: *Transformación local de escala* $s(x)$.

Una vez obtenida la LST se construye la base THO. En la figura 1.5 se presentan las primeras cinco funciones THO. Se puede observar cómo conforme n aumenta las funciones de onda THO se extienden cada vez más, al mismo tiempo que oscilan también más.

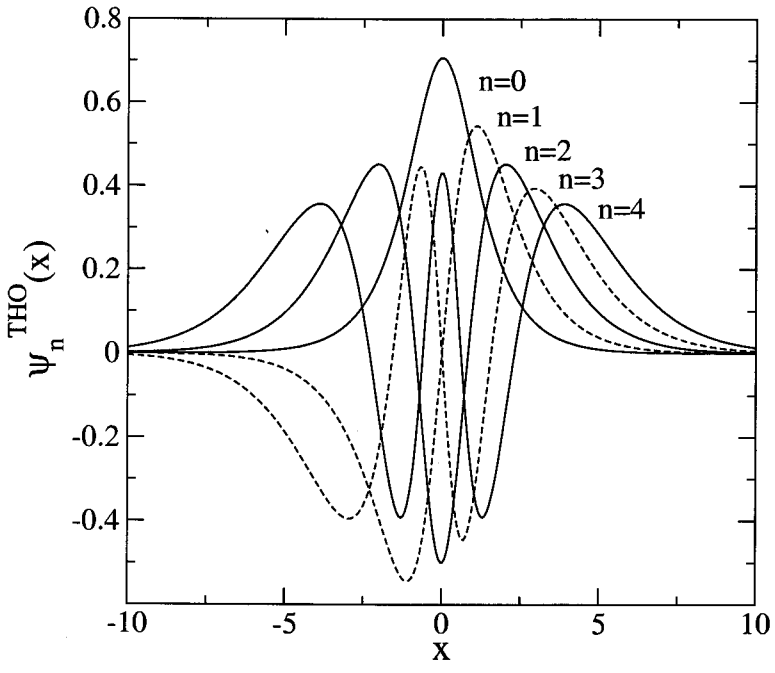


Figura 1.5: *Primeras cinco funciones de onda THO.*

Finalmente, si se toman N estados excitados de la base generada, se calculan los elementos de matriz del hamiltoniano según la ecuación (1.24) y se diagonaliza este, se obtienen sus autovalores y autofunciones en ese subespacio. Como el hamiltoniano es par, los estados con distinta paridad no se mezclan. Por ello, se va a diagonalizar en un subespacio con M estados pares excitados. En la figura 1.6 se presenta el espectro de energía como una función de M y en la figura 1.7 se presentan las autofunciones para $M = 9$. Se observa cómo en la figura 1.6 se recupera exactamente el estado fundamental del sistema y cómo conforme aumenta M hay más niveles empaquetados en la zona ruptura mientras otros niveles alcanzan energías más altas. Por otra parte en la figura 1.7 se observa cómo las autofunciones oscilan cada vez más conforme aumenta j al mismo tiempo que se extienden más.

Para el método TOP la condición de ortogonalidad permite calcular la familia de polinomios ortogonales mónicos según la ecuación (1.38) con $m < n$ para cada n. Como la función peso es par, los polinomios deben tener paridad bien definida y, por lo tanto, se cumple $C_{nk} = 0$ si n y k tienen diferente paridad. Con todo

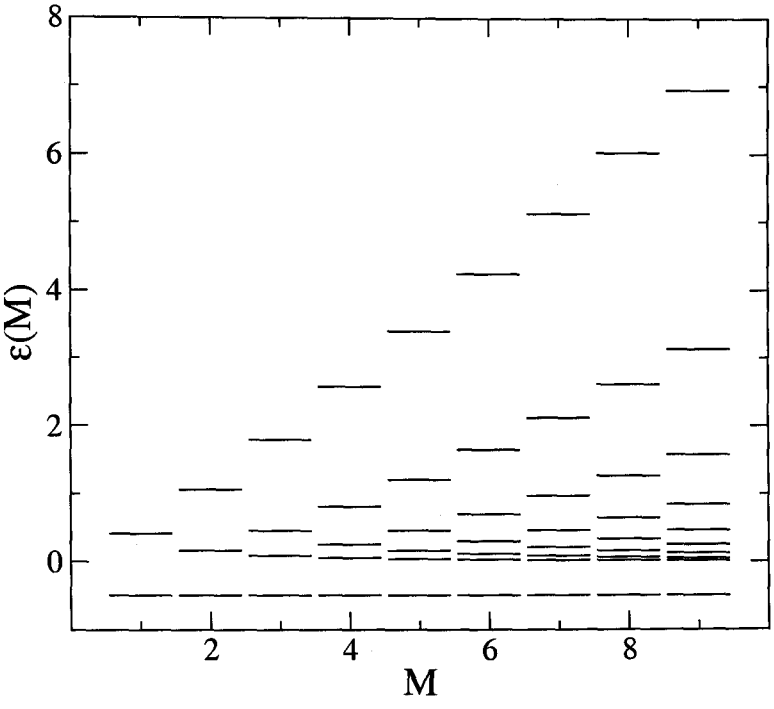


Figura 1.6: *Niveles de energía en la base THO como una función del número de estados incluidos en la base.*

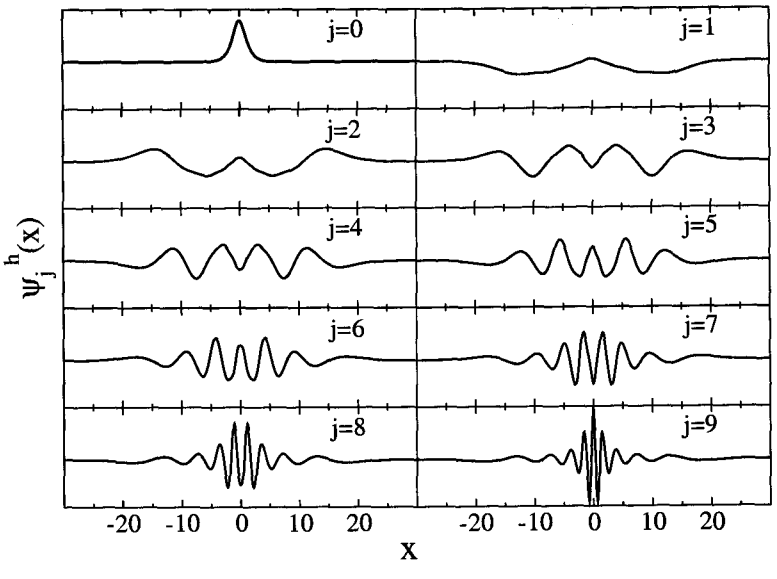


Figura 1.7: *Autofunciones de la base THO con* $M = 9$.

esto se van obteniendo los primeros polinomios:

$$P_0^{TOP}(x) = 1, \tag{1.50}$$

$$P_1^{TOP}(x) = x, \tag{1.51}$$

$$P_2^{TOP}(x) = -\frac{\pi^2}{12} + x^2, \tag{1.52}$$

$$P_3^{TOP}(x) = -\frac{7\pi^2}{20}x + x^3, \tag{1.53}$$

$$P_4^{TOP}(x) = \frac{27\pi^4}{560} - \frac{13\pi^2}{14}x^2 + x^4, \tag{1.54}$$

$$P_5^{TOP}(x) = \frac{407\pi^4}{1008}x - \frac{35\pi^2}{18}x^3 + x^5. \tag{1.55}$$

Como es sabido, los polinomios ortogonales deben cumplir una relación de recurrencia de tres términos, que para los polinomios mónicos es de la forma

$$P_n(x) = (x - b_n)P_{n-1}(x) - a_n^2 P_{n-2}(x). \tag{1.56}$$

En este caso se deduce, por un lado, que $b_n = 0$ por paridad y, por otro, a_n^2 a partir de los primeros polinomios obtenidos

$$a_n^2 = \frac{(n-1)^4\pi^2}{2^2(2n-1)(2n-3)}, \tag{1.57}$$

por lo tanto se tiene

$$P_n^{TOP}(x) = xP_{n-1}(x) - \frac{(n-1)^4\pi^2}{2^2(2n-1)(2n-3)}P_{n-2}(x). \tag{1.58}$$

Una vez obtenidos los polinomios TOP también se puede deducir una expresión general, en función de n, para la norma de las funciones de onda a partir de la ecuación (1.44),

$$M_n = \frac{2^n(2n-1)!!\sqrt{2n+1}}{(n!)^2\pi^n}. \tag{1.59}$$

Una vez obtenida la familia de polinomios, se construye la base TOP. En la figura 1.8 se presentan las primeras cinco funciones TOP. Se puede observar cómo conforme n aumenta las funciones de onda TOP se extienden cada vez más al mismo tiempo que oscilan también más.

Finalmente, una vez obtenida la base, si se toman de nuevo N estados excitados de la base generada y se diagonaliza el hamiltoniano, se obtienen sus autovalores y autofunciones en ese subespacio. De nuevo, como el hamiltoniano

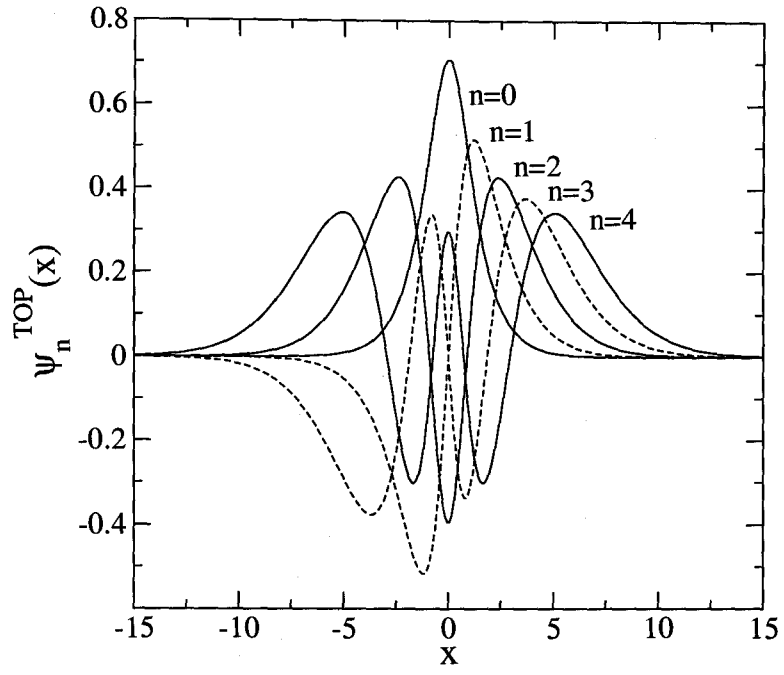


Figura 1.8: *Primeras cinco funciones de onda TOP.*

es par, se va a diagonalizar en un subespacio con M estados pares excitados. En la figura 1.9 se presenta el espectro de autovalores como una función de M y en la figura 1.10 se presentan las autofunciones para $M = 9$. De nuevo, se observa cómo en la figura 1.9 se recupera exactamente el estado fundamental del sistema y cómo conforme aumenta M hay más niveles empaquetados en la zona ruptura mientras otros niveles alcanzan energías más altas. Por otra parte en la figura 1.10 se observa como las autofunciones oscilan cada vez más conforme aumenta j al mismo tiempo que se extienden más.

Si se comparan los resultados de ambos métodos se pueden destacar los siguientes puntos:

- Se puede ver cómo la base TOP se extiende más que la base THO. Aunque en ambos casos se tiene que el estado $n = 0$ coincide exactamente con el estado fundamental ligado y conforme aumenta n las funciones se extienden y oscilan más.

- Se puede ver cómo las autofunciones de la energía que se obtienen con el método TOP son más extensas que las del THO. Esto se debe a que en

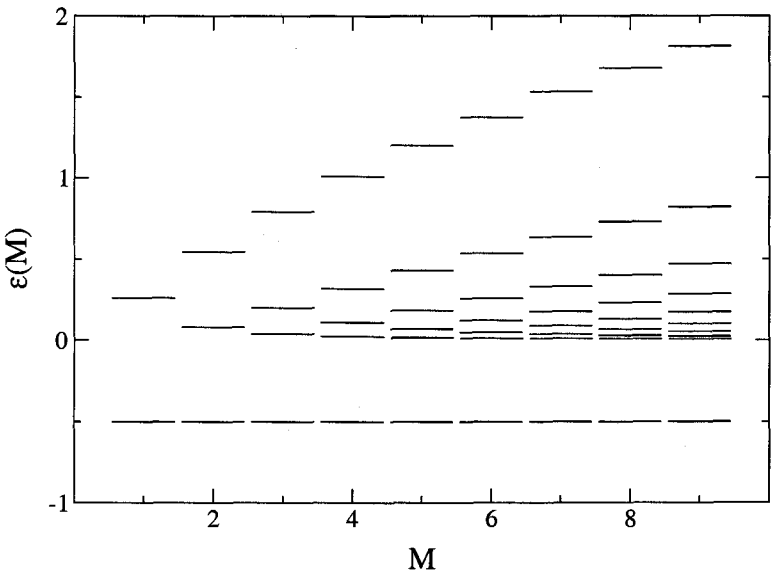


Figura 1.9: *Niveles de energía en la base TOP como una función del número de estados incluidos en la base.*

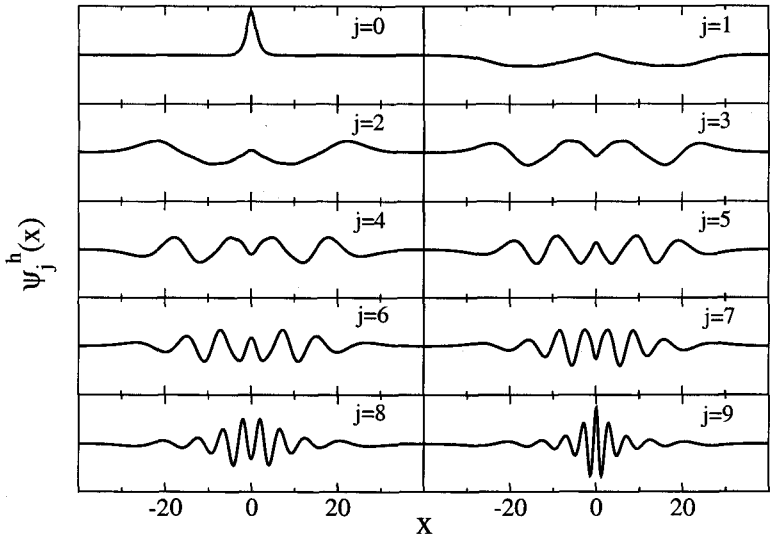


Figura 1.10: *Autofunciones de la base TOP con* $M = 9$.

el primer caso se está utilizando una familia de polinomios en la variable $s = x$ y en el segundo en la variable $s = \text{erf}^{-1}(\tanh(x))$. De esta forma el primer método será mejor para operadores de largo alcance y el segundo para operadores de corto alcance.

- En ambos métodos se observa cómo las autofunciones son cada vez más extensas al aumentar j, para un valor fijo de M.
- También se puede ver cómo los autovalores obtenidos con el método THO llegan a energías más altas que los del TOP. Esto se puede entender cualitativamente: cómo las funciones de onda en el espacio de coordenadas son menos extensas para el método THO que para el método TOP, las funciones de onda en el espacio de momentos son más extensas.
- En ambos aparece un único estado ligado y el resto de niveles aparece por encima del umbral de ruptura que está en $\varepsilon = 0$.
- También se ve cómo conforme aumenta el número M de estados considerados en la diagonalización, aparecen por un lado más estados con energías empaquetadas en la zona de ruptura y por otro estados con energías cada vez más altas.

Haciendo una recopilación de las diferentes publicaciones de nuestro grupo sobre el método OP se tiene que en los trabajos [91, 92] se presenta el método THO por primera vez con la condición de que la función de onda del estado fundamental del sistema se convierta en la función del estado fundamental del HO. En ellos se presentan los primeras pruebas aplicando el método a dos potenciales en 1D de interés en física molecular, Pöschl-Teller [112] y Morse [136], y se estudia la convergencia de diferentes observables de estructura como reglas de suma; en ambos casos se observa una rápida convergencia conforme la base THO se incrementa. En los trabajos [93, 94] el método THO se utiliza para describir reacciones. En el artículo [93] el método THO se aplica al deuterón describiendo la interacción protón-neutrón por medio de un potencial de Pöschl-Teller. En este trabajo se discute el acoplamiento a los estados de ruptura para la colisión d+^{208}Pb a 50 MeV que no presenta resonancias y se obtiene una convergencia adecuada de las secciones eficaces elásticas y de ruptura conforme se aumenta la dimensión de la base. También se muestra cómo los resultados obtenidos convergen a los obtenidos con el método estándar de *bins* del CDCC. En el artículo [94] se presenta un problema unidimensional en el que un objeto, compuesto de dos fragmentos sin estructura, colisiona con un potencial repulsivo. Este potencial se aproxima como la suma de un potencial de convolución, que determina la trayectoria clásica del centro de masas, y un potencial de marea que actúa sobre

la coordenada relativa. En este trabajo se usa una aproximación semiclásica en la que el potencial de convolución determina la trayectoria del centro de masas mientras que la evolución del estado interno del sistema compuesto es determinado por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo, que es proyectada en una base THO finita. En él se investiga la convergencia de magnitudes de dispersión conforme el número de estados en la base THO aumenta. También se investiga el papel del acoplamiento continuo-continuo. En el trabajo [95] se presenta por primera vez el método general OP aplicado a potenciales en 1D. Dentro del método general se tratan tres casos particulares, el método THO, el TOP y el de polinomios ortogonales en la variable natural (Natural Orthogonal Polynomial, NOP). Aplicándolos de nuevo a los potenciales Pöschl-Teller y Morse se comparan los diferentes métodos comprobando la convergencia de reglas de suma relevantes. En este trabajo se encuentra que el método TOP es óptimo para operadores de largo alcance mientras que el NOP es más adecuado para operadores de rango corto. Por otra parte el método THO aparece como un buen compromiso que va bien en ambos casos. También se ha investigado la descripción de los estados ligados excitados, encontrándose que los métodos THO y TOP dan una convergencia rápida mientras que el método NOP tiene una convergencia más lenta. Para el caso de un potencial de pozo cuadrado semi-infinito se obtiene que el comportamiento radial de las funciones de onda THO y TOP se compara razonablemente con el de los *bins* construidos a partir de las funciones de onda del continuo real. Todo este trabajo realizado abre las puertas a la aplicación del método OP a casos que presentan resonancias y a sistemas de tres cuerpos, tanto para el estudio de estructura como de reacciones.

En este apartado se ha presentado el método OP aplicándolo a un caso sencillo en 1D con un potencial de Pöschl-Teller. Dentro del método general OP se han explicado dos casos particulares que se utilizarán en este trabajo, los métodos THO y TOP. Finalmente se ha hecho una recopilación de los trabajos ya realizados con este método.

1.5. Tratamiento de colisiones con acoplamiento al continuo

En este apartado se va a discutir el procedimiento mejor establecido actualmente para el tratamiento de colisiones con acoplamiento al continuo. Se hará una introducción del mismo, desde su aplicación más convencional a otras más actuales.

Una forma de incluir de manera explícita el efecto de los estados excitados sobre el canal elástico es mediante un cálculo de canales acoplados. En el caso de sistemas fuertemente ligados el método consiste en resolver la ecuación de Schrödinger considerando el estado fundamental y aquellos estados ligados (discretos) fuertemente acoplados con este. Pero para el caso de sistemas débilmente ligados, el acoplamiento con estados del continuo (no ligados) es importante y el procedimiento no es directamente aplicable. Entonces se recurre a la generalización conocida como canales acoplados discretizados en el continuo (Continuum Discretized Coupled Channels, CDCC) [79, 113, 114]. En un cálculo CDCC la función de onda total se desarrolla en términos del conjunto formado por la base de estados internos del proyectil, incluyendo tanto los estados ligados como el continuo. Ejemplos de sistemas donde es necesario aplicar el CDCC son el deuterón, ^{6}Li y los núcleos ligeros ricos en neutrones ^{6}He, ^{11}Li y ^{19}C, en los cuales el proyectil tiene sólo un estado ligado. Las fuerzas de marea acoplarán fuertemente este estado ligado al continuo.

A continuación se va a proceder a desarrollar brevemente el formalismo CDCC por ser el método de referencia que se empleará en el trabajo. Se va a considerar un núcleo proyectil formado por n partículas con una energía incidente en el sistema laboratorio E_{lab}. Se acepta que el estado fundamental del proyectil es un estado ligado de los n constituyentes, ϕ_0. También se acepta que cada constituyente j interactúa con el núcleo blanco a través de una interacción efectiva a dos cuerpos $\widehat{V}_{jt}$, que en general es compleja y central. La ecuación de Schrödinger que cumplen las funciones de onda de dispersión de la partícula efectiva proyectil-blanco $(n+1)$, cuando el proyectil incide con un vector de onda $\vec{K}_0$ en el sistema C. M., es

$$[\widehat{H} - E]\Psi^{(+)}_{\vec{K}_0}(\{\vec{r}_i\}, \vec{R}) = 0, \tag{1.60}$$

donde $\vec{R}$ es la posición del C. M. del proyectil respecto al blanco y $\{\vec{r}_i\}$ son las

$n-1$ coordenadas independientes del proyectil. Por otra parte el hamiltoniano es $\widehat{H} = \widehat{T}_R + \widehat{U}(\{\vec{R}_j\}) + \widehat{h}$, donde $\widehat{h}$ es el hamiltoniano interno del proyectil, $\widehat{T}_R$ el operador energía cinética del sistema reducido proyectil-blanco y $\widehat{U}(\{\vec{R}_j\}) = \sum_{j=1}^{n} \widehat{V}_{jt}(\vec{R}_j)$ es la interacción total entre el proyectil y el blanco. Aquí $\{\vec{R}_j\}$ son las posiciones de las n partículas del proyectil respecto al blanco. La función de onda del estado fundamental de proyectil satisface la ecuación

$$\widehat{h}\phi_0 = -\varepsilon_0\phi_0. \tag{1.61}$$

Se buscan soluciones $\Psi^{(+)}_{\vec{K}_0}$ que satisfagan las condiciones de contorno de dispersión

$$\Psi^{(+)}_{\vec{K}_0}(\{\vec{r}_i\}, \vec{R}) = e^{i\vec{K}_0\cdot\vec{R}}\phi_0 + \text{ondas salientes.} \tag{1.62}$$

La técnica establecida ha sido formulada y aplicada para la dispersión de proyectiles $n = 2$, tales como el deuterón $(n+p)$, ^{6}Li $(\alpha + d)$ y ^{7}Li $(\alpha + t)$ y se puede encontrar una revisión en las referencias [79, 114]. Cuando el proyectil se describe como una sola partícula, p, fuera del core, c, su estado puede ser perturbado por la interacción con el núcleo blanco conforme las fuerzas de marea del blanco actúan sobre la partícula y el core diferenciadamente. La interacción proyectil-blanco se separa en la interacción del blanco con el core, $\widehat{V}_{ct}(\vec{R}_c)$, y en la interacción del blanco con la partícula fuera del core, $\widehat{V}_{pt}(\vec{R}_p)$. Las componentes nuclear y coulombiana se deben incluir a la vez.

Las coordenadas de posición de los fragmentos del proyectil respecto al blanco son, en función de la coordenada del proyectil respecto al blanco, $\vec{R}$, y la coordenada interna del proyectil, $\vec{r}$,

$$\vec{R}_p = \vec{R} + \frac{A-1}{A}\vec{r}, \tag{1.63}$$

$$\vec{R}_c = \vec{R} - \frac{1}{A}\vec{r}, \tag{1.64}$$

donde A es la masa del proyectil en unidades de masa del nucleón.

Los estados excitados del continuo del proyectil, $u_{lsj}(k, r)$, están determinados por el momento k, el momento angular orbital l, el espín s de la partícula fuera del core[3] y el momento angular total del proyectil j. Pero los potenciales de acoplamiento inelásticos no convergen porque las funciones de onda del continuo no decaen a cero conforme $r \to \infty$ lo suficientemente rápido como para ser de

[3]De nuevo, por simplicidad se considera que el espín del core es cero.

cuadrado integrable. Entonces, para generar las funciones de onda internas del proyectil se utiliza el método de *bins* en el cual el continuo del proyectil se divide en un conjunto de intervalos de anchura $\Delta k_i = k_i - k_{i-1}$. El método se puede implementar de dos formas: el método del punto medio (Mid-point, Mid) y el método promedio (Average, Av). En el método Mid los canales incluidos en cada *bin* se sustituyen por el punto medio del mismo. Estos estados son etiquetados con el número i que denota los momentos límite $[k_{i-1}, k_i]$ y los números cuánticos de momento angular $(ls)j$. La función de onda del *bin* se define

$$u_{ilsj}(r) = \sqrt{\Delta k}\; u_{lsj}\left((k_{i-1} + k_i)/2, r\right). \tag{1.65}$$

En el método Av se toman estados *bin* que son de cuadrado integrable obtenidos haciendo un promedio sobre este rango de energías. La función de onda del *bin* se define en este caso como

$$u_{ilsj}(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi N_i}} \int_{k_{i-1}}^{k_i} f_i(k) e^{-i\delta_{lj}(k)} u_{lsj}(k, r) dk, \tag{1.66}$$

$$N_i = \int_{k_{i-1}}^{k_i} |f_i(k)|^2 dk, \tag{1.67}$$

siendo $\delta_{lj}(k)$ el corrimiento de fase para $u_{lsj}(k, r)$. Estos estados están normalizados a la unidad, una vez que que se elige un radio máximo r_{bin} suficientemente grande. El factor de fase $e^{-i\delta_{lj}(k)}$ asegura que la función de onda sea real para potenciales reales $\widehat{V}^l_{pc}(r)$. Para un continuo no resonante, típicamente $f_i(k) = 1$ siendo $N_i = \Delta k_i$. La elección $f_i(k) = k$ es útil para $l = 0$. Para resonancias aisladas [113] las elecciones $f_i(k) = |i\Gamma/(2(\varepsilon_k - \varepsilon_i) + i)|$ ó $f_i(k) = \text{sen}\,\delta_{lj}(k)$ proporcionan una descripción más precisa de la intensidad de la resonancia dentro de un *bin*. El método Av se usa más porque requiere menos trabajo numérico, pero no se ha desarrollado todavía para proyectiles de tres cuerpos por su gran complejidad.

La función de onda del sistema de tres cuerpos se desarrolla como

$$\Psi^{(+)}_{\vec{K}_0}(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{JML_0} C^{L_0}_{JM}(\vec{K}_0) \Psi_{JM}(\vec{R}, \vec{r}) \tag{1.68}$$

donde

$$\Psi_{JM}(\vec{R}, \vec{r}) = \sum_{ilj\mu LM_L} \phi^{j\mu}_{ils}(\vec{r}) \langle LM_L j\mu | JM \rangle i^L Y_{LM_L}(\widehat{R}) \frac{1}{R} f^J_{Lilj}(R), \tag{1.69}$$

siendo L el momento angular orbital relativo entre el proyectil y el blanco y J el momento angular total del sistema. Ψ_{JM} lleva implícita la dependencia en el momento angular orbital inicial L_0 a través de la condición (1.75). Aquí el estado interno del proyectil es

$$\phi_{ils}^{j\mu}(\vec{r}) = \frac{1}{r} u_{ilsj}(r) \sum_{m_l \sigma} \langle l m_l s \sigma | j \mu \rangle Y_{l m_l}(\hat{r}) \chi_s^\sigma, \tag{1.70}$$

donde χ_s^σ es el estado intrínseco de espín de la partícula fuera del core e $i = 0$ denota el estado fundamental. En lo que sigue, para hacer más ligera la notación, se va a abreviar $\alpha \equiv \{L, i, l, s, j\}$. Las funciones de onda radiales $f_{Lilj}^J(R)$ satisfacen el conjunto de ecuaciones acopladas

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_r} \left(\frac{d^2}{dR^2} - \frac{L(L+1)}{R^2} \right) + \varepsilon_i - E \right] f_\alpha^J(R) + \sum_{\alpha'} i^{L'-L} V_{\alpha,\alpha'}^J(R) f_{\alpha'}^J(R) = 0, \tag{1.71}$$

donde m_r es la masa reducida del sistema proyectil-blanco y ε_i es la energía promedio del *bin* del continuo $[k_{i-1}, k_i]$, cumpliéndose la relación de conservación de la energía

$$E = \frac{\hbar^2 K_0^2}{2m_r} + \varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 K_i^2}{2m_r} + \varepsilon_i. \tag{1.72}$$

Los factores $V_{\alpha,\alpha'}^J(R)$ describen los acoplamientos entre diferentes estados de movimiento relativo

$$V_{\alpha,\alpha'}^J(R) = \langle \alpha J M | \widehat{V}_{ct}(\vec{R}_c) + \widehat{V}_{pt}(\vec{R}_p) | \alpha' J M \rangle, \tag{1.73}$$

con el ket $|\alpha J M\rangle$ denotando la función

$$\Phi_\alpha^{JM}(\widehat{R}, \vec{r}) = \sum_{M_L \mu} \phi_{ils}^{j\mu}(\vec{r}) \langle L M_L j \mu | J M \rangle Y_{L M_L}(\widehat{R}). \tag{1.74}$$

La evaluación de estos potenciales de acoplamiento y la resolución de la ecuaciones acopladas (1.71), incluye truncaciones del espacio modelo CDCC:

- Doble truncamiento en k y l, de manera que el espacio modelo queda reducido al subespacio $0 \leq k \leq k_{max}$ y $0 \leq l \leq l_{max}$. Esta aproximación está justificada si la solución del problema converge a la solución exacta a medida que el espacio modelo es ampliado.

- También es necesario fijar un valor máximo, R_{max}, en la integración de la ecuaciones acopladas, a partir de la cual se supone que la solución obedece al comportamiento asintótico

$$f^J_{Lilj}(R) \to I_{L_0}(K_0R)\delta_{i0} - \sqrt{\frac{K_0}{K_i}} S^J_{Lilj,L_0 0 l_0 j_0} O_L(K_iR), \tag{1.75}$$

donde I_L y O_L son la funciones de Coulomb entrante y saliente, $S^J_{Lilj,L_0 0 l_0 j_0}$ es la matriz S elástica o de ruptura y $(L_0 0 l_0 j_0)$ son las condiciones iniciales, suponiendo que el sistema está en su estado fundamental inicialmente. La aproximación sólo tendrá sentido si la solución converge al aumentar paulatinamente el valor de R_{max}.

Para calcular los potenciales de acoplamiento (1.73) se realiza un desarrollo multipolar de la interacción proyectil-blanco. Asumiendo que los potenciales $\widehat{V}_{ct}$ y $\widehat{V}_{pt}$ son centrales, los coeficientes del desarrollo multipolar se generan a partir de

$$\mathcal{V}_Q(R,r) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{+1} [\widehat{V}_{ct}(R_c) + \widehat{V}_{pt}(R_p)] P_Q(x) dx \tag{1.76}$$

donde $P_Q(x)$ es un polinomio de Legendre, Q es el multipolo y $x = \hat{r}\cdot\hat{R}$ es el coseno del ángulo que forman $\vec{r}$ y $\vec{R}$. Si s es el espín fijo de la partícula fuera del core, el potencial de acoplamiento entre estados $u_{i'l's j'}(r)$ y $u_{ils j}(r)$ es

$$V^J_{\alpha,\alpha'}(R) = \sum_Q (-1)^{j+j'-J-s} \hat{j}\hat{j}'\hat{l}\hat{l}'\hat{L}\hat{L}'(2Q+1) W(jj'll';Qs) W(jj'LL';QJ)$$
$$\times \begin{pmatrix} Q & l & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q & L & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{r_{bin}} dr\; u_{ils j}(r) \mathcal{V}_Q(R,r) u_{i'l's j'}(r). \tag{1.77}$$

El método CDCC se desarrolló inicialmente para ser aplicado a la dispersión de deuterio y, por lo tanto, la mayoría de las aplicaciones se han efectuado para analizar tanto la dispersión elástica como los procesos de ruptura de este núcleo [79, 113, 114]. En este contexto es posible extender el método a núcleos con halo que se describan como un core más una partícula fuera de él. En la referencia [115] se ha aplicado el formalismo para estudiar la dispersión de ^{8}B por ^{58}Ni a 26 MeV. En dicho trabajo se compara el cálculo realizado empleando CDCC con el realizado con la aproximación de Born de onda distorsionada (Distorted Wave Born-Approximation, DWBA) [116], en el cual el conjunto de ecuaciones

acopladas se resuelve de forma perturbativa incluyendo un número finito de pasos. Los resultados obtenidos con DWBA con un sólo paso se han presentado en artículos anteriores [117–119] y los resultados son cualitativamente similares a los obtenidos en el trabajo [120], donde se utiliza otro método de discretización utilizando un mallado en energía. Por su parte, en el artículo [115], los resultados muestran que sólo existe acuerdo entre ambas aproximaciones, CDCC y DWBA, cuando se incluye un número suficiente de iteraciones en la segunda. Además, para conseguir la convergencia del cálculo perturbativo es necesario emplear técnicas de aceleración de Padé. En este artículo se muestra cómo en reacciones con elevada probabilidad de transición se hace necesario el uso de tratamientos no perturbativos como el CDCC o, por lo menos, ir más allá del primer orden en tratamientos perturbativos.

Algunos posibles inconvenientes del cálculo CDCC son los siguientes:

- El procedimiento no es fácilmente aplicable al caso de ruptura coulombiana debido a la lenta convergencia en el caso de interacciones de largo alcance.
- Es difícil extender el método a proyectiles con más de dos fragmentos.
- El método ignora la dependencia con la energía de los potenciales ópticos. En la formulación del método se requiere el potencial óptico de cada fragmento con el blanco. Como es sabido, estos potenciales presentan una cierta dependencia con la energía. Se plantea, por tanto, la incertidumbre de a qué energía evaluar dichos potenciales. La elección habitual es tomar el potencial óptico correspondiente a la situación en que cada fragmento tiene una velocidad con respecto al blanco igual al del proyectil completo.
- La convergencia del método a medida que se incrementa el espacio modelo debe ser objeto de estudio y discusión. No obstante, muchos trabajos parecen mostrar que el método CDCC converge a medida que se aumentan l_{max} y k_{max} y se disminuye Δk. En el trabajo [121] se obtuvo por primera vez la convergencia de las secciones eficaces elástica y de ruptura para la reacción d+^{58}Ni a 80 MeV.
- Aunque se obtenga convergencia, queda abierta la cuestión de si la solución obtenida coincide con la solución exacta del problema de tres cuerpos. Este tema se ha tratado en las referencias [122, 123] donde se argumenta que la

solución CDCC se puede considerar como una aproximación de primer orden a un conjunto de ecuaciones de Faddeev y se encuentra que las correcciones disminuyen a medida que el espacio modelo se incrementa, a menos que se generen ondas entrantes en los canales de ruptura para $R \geq R_{max}$. Respecto a ello en [124] se ha comprobado para la reacción d+^{58}Ni a 80 MeV que para $R > 30$ fm apenas se generan ondas entrantes.

- Otro problema es la posible dependencia del resultado final con el método empleado para discretizar el continuo. En concreto el método de *bins* Av ha sido cuestionado [125, 126] porque en este caso los potenciales de acoplamiento decaen como R^{-4} mientras que originalmente lo hacen como R^{-2}. Esto lleva a una supresión ficticia de los acoplamientos entre canales a distancias grandes. En la referencia [124] se ha comparado el método Av con el método Mid, que sí posee el comportamiento asintótico adecuado, y parece mostrar que ambos conducen a los mismos resultados.

Como el método de *bins* Av para discretizar el continuo de estados de proyectiles de dos cuerpos no se puede desarrollar fácilmente para el caso de proyectiles de tres cuerpos, recientemente se ha propuesto el método del pseudoestado (Pseudo-State, PS) [80] y se ha examinado para proyectiles de dos cuerpos. Una ventaja de este método es que puede ser fácilmente extendido al caso de proyectiles de tres cuerpos. En el método PS las funciones de onda discretizadas de ruptura se obtienen diagonalizando el hamiltoniano interno del proyectil usando bases de funciones normalizables. En la referencia [80] se emplean dos tipos de bases radiales. Una es la convencional formada por funciones gaussianas de rango real

$$R_{il}(r) = r^l \exp\left[-(r/a_i)^2\right] \qquad i = 1, \ldots, N \tag{1.78}$$

donde a_i se supone que aumenta en progresión geométrica

$$a_i = a_1 (a_N/a_1)^{(i-1)/(N-1)}. \tag{1.79}$$

La otra base es una extensión introduciendo el par de funciones

$$R^C_{il}(r) = r^l \exp\left[-(r/a_i)^2\right] \cos\left[b(r/a_i)^2\right], \tag{1.80}$$

$$R^S_{il}(r) = r^l \exp\left[-(r/a_i)^2\right] \operatorname{sen}\left[b(r/a_i)^2\right]. \tag{1.81}$$

Así el número total de funciones es $2N$. También se pueden expresar de la forma siguiente

$$R_{il}^{C}(r) = \left[R_{il}^{*}(r) + R_{il}(r)\right]/2, \tag{1.82}$$

$$R_{il}^{S}(r) = \left[R_{il}^{*}(r) - R_{il}(r)\right]/(2i), \tag{1.83}$$

con

$$R_{il}(r) = r^{l}\exp\left[-\eta_i r^2\right] \qquad \eta_i = (1+ib)/a_i^2. \tag{1.84}$$

Por ello, se refiere a R_{il}^{C} y R_{il}^{S} como base gaussiana de rango complejo. Estas funciones oscilan con r y, por lo tanto, se espera que simulen mejor que las de rango real el patrón de oscilación de los estados del continuo de ruptura. En el método PS, se resuelve el hamiltoniano del sistema en una base gaussiana finita con N estados $\{\psi_{ils}^{j\mu}(\vec{r}), i = 1,\ldots,N\}$, donde

$$\psi_{ils}^{j\mu}(\vec{r}) = R_{il}(r)\sum_{m_l\sigma}\langle lm_l s\sigma|j\mu\rangle Y_{lm_l}(\hat{r})\chi_s^{\sigma}. \tag{1.85}$$

Hay que tener en cuenta que esta base no es ortogonal y aplicar procedimientos específicos. Así, se obtienen N autoestados $\{\phi_{nls}^{j\mu}(\vec{r}), n = 0,\ldots,N-1\}$ para cada conjunto de números cuánticos $\{l,s,j,\mu\}$.

El método PS tiene por lo menos dos ventajas sobre el ampliamente usado método Av del *bin* promedio. Una es que no se necesita resolver la ecuación de Schrödinger en toda la región de r. Otra es que con las bases gaussianas se pueden calcular todos los potenciales de acoplamiento semianalíticamente. Una ventaja adicional es que cuando el proyectil se considera formado por tres cuerpos las bases gaussianas con rangos reales y complejos se pueden utilizar fácilmente en cálculos CDCC con el método PS. En el caso de proyectiles de dos cuerpos, otra ventaja del método PS es que los elementos de matriz S discretos, $S^{J}_{Lnlj,L_0 0 l_0 j_0}$, para la transición del estado fundamental $\phi_{0l_0 s}^{j_0\mu_0}(\vec{r})$ al estado $\phi_{nls}^{j\mu}(\vec{r})$ se pueden transformar con precisión a elementos de matriz S suavizados de la forma

$$\widetilde{S}^{J}_{Llj,L_0 0 l_0 j_0}(k) = \sum_{n}\langle lsj,k|nlsj\rangle S^{J}_{Lnlj,L_0 0 l_0 j_0}, \tag{1.86}$$

donde el ket $|nlsj\rangle$ denota la función de onda $\phi_{nls}^{j}(\vec{r})$ y $|lsj,k\rangle$ denota la función de onda exacta del movimiento interno del proyectil de dos cuerpos, $\widetilde{\phi}_{ls}^{j}(k,\vec{r})$.

En este trabajo [80] se aplica el CDCC de tres cuerpos con el método PS a la dispersión ^{6}Li+^{40}Ca a 156 MeV considerando sólo la ruptura nuclear. Posteriormente en el artículo [127] se presenta el CDCC de tres cuerpos con el método

PS a la dispersión ^{8}B+^{58}Ni a 25,8 MeV teniendo en cuenta tanto la ruptura nuclear como coulombiana. El método PS reproduce muy bien la solución obtenida con el método de *bins*. Cabe mencionar que para tratar los procesos de ruptura nuclear y coulombiana a energías intermedias con alta precisión y velocidad computacional, en el artículo [128] se propone un nuevo método. Éste consiste en descomponer la amplitud de dispersión de ruptura en ondas parciales bajas y altas; las primeras se tratan con el método CDCC convencional y las segundas con una nueva versión en la que se asume que la trayectoria del proyectil es una línea recta y recibe el nombre de Eikonal-CDCC (E-CDCC). Este método se aplica a la reacción ^{8}B+^{58}Ni a 240 MeV, mostrando que este cálculo híbrido está bien diseñado para tratar procesos de ruptura nuclear y coulombiana. Se han propuesto cálculos eikonales y adiabáticos que se han aplicado a la dispersión de ^{6}He y de ^{11}Li alrededor de 50MeV/nucleón [129–131]. Como éstos están basados en aproximaciones eikonales van bien para altas energías incidentes, pero no parecen ser aplicables para dispersiones a baja energía o ángulos grandes.

En la referencia [132] se extiende el CDCC a cuatro cuerpos para ruptura nuclear con el método PS. Se presenta el cálculo aplicado a la reacción ^{6}He+^{12}C a 18 MeV y 229,8 MeV, donde sólo se considera la ruptura nuclear porque la energía incidente es mucho más grande que la barrera de Coulomb ($\sim$ 3 MeV) y el potencial de Coulomb se trata aproximadamente como una función de R. En este caso la función de onda del proyectil de tres cuerpos se escribe como una suma de funciones componentes en las coordenadas de Jacobi para los sistemas $k = 1, 2, 3$

$$\phi_{nj\mu}(\{\vec{x}_k, \vec{y}_k\}) = \sum_{k=1}^{3} \phi^{(k)}_{nj\mu}(\vec{x}_k, \vec{y}_k). \tag{1.87}$$

Cada $\phi^{(k)}_{nj\mu}(\vec{x}_k, \vec{y}_k)$ se desarrolla en funciones gaussianas

$$\begin{aligned}\phi^{(k)}_{nj\mu}(\vec{x}_k, \vec{y}_k) = \varphi^{\alpha} \sum_{l_{xk} l_{yk} l_k S} \sum_{i=1}^{i_{max}} \sum_{q=1}^{q_{max}} A^{(k)j\mu}_{i l_{xk} q l_{yk} l_k S} x_k^{l_{xk}} y_k^{l_{yk}} e^{-(x_k/\bar{x}_i)^2} e^{-(y_k/\bar{y}_q)^2} \\ \times \left[\left[Y_{l_{xk}}(\hat{x}_k) \otimes Y_{l_{yk}}(\hat{y}_k) \right]_{l_k} \otimes \left[\eta^{(n_1)}_{1/2} \otimes \eta^{(n_2)}_{1/2} \right]_S \right]_{j\mu},\end{aligned} \tag{1.88}$$

donde l_{xk} es el momento angular relacionado con la coordenada de Jacobi $\vec{x}_k$, l_{yk} el relacionado con $\vec{y}_c$ y $\eta_{1/2}$ es la función de onda de espín de cada neutrón de valencia. ^{4}He se trata como un core inerte con configuración interna $(0s)^4$, φ^{α}. Las

energías ε_{nj} de ^{6}He y los correspondientes coeficientes del desarrollo $A^{(k)j\mu}_{il_{xk}ql_{yk}l_kS}$ se determinan diagonalizando el hamiltoniano del movimiento interno de ^{6}He usando una base gaussiana grande de tres cuerpos. La energía calculada para el estado fundamental 0^+ es $-0{,}98$ MeV y 0,72 MeV para la resonancia 2^+. La profundidad del potencial $n+\alpha$ se aumenta para reproducir la energía del estado fundamental. En este trabajo se toman los estados $j^\pi = 0^+, 2^+$ y se omiten los estados 1^- y 3^- porque no contribuyen a los procesos de ruptura nuclear (pero hay que incluirlos en los cálculos de ruptura nuclear y coulombiana). En este artículo se encuentra que estados con $\varepsilon_{nj} > 12$ MeV a la energía de dispersión de 18 MeV y con $\varepsilon_{nj} > 25$ MeV a la energía de dispersión de 229,8 MeV no tienen efecto en los elementos de matriz S elásticos y de ruptura.

Debe hacerse notar que la ecuación CDCC para un sistema de cuatro cuerpos (proyectil de tres cuerpos) es formalmente igual que para un sistema de tres cuerpos (1.71) (proyectil de dos cuerpos). Lo que varía son los potenciales de acoplamiento de dicha ecuación. En el trabajo [132] se adopta el modelo de la doble convolución [133] como sigue

$$\begin{aligned} V^J_{\alpha,\alpha'}(R) &\equiv \langle \Phi^{JM}_\alpha; \Psi^{(t)}_{g.s.} | \sum_{i\in p}\sum_{q\in t} v_{iq} | \Psi^{(t)}_{g.s.}; \Phi^{JM}_{\alpha'} \rangle \\ &= \int \rho^{(p)J}_{\alpha,\alpha'}(\vec{r}_p, \widehat{R}) \rho^{(t)}_{g.s.}(\vec{r}_t) v_{nn}(\vec{s}) d\vec{r}_t d\vec{r}_p d\widehat{R}, \end{aligned} \tag{1.89}$$

donde $\vec{r}_p$ es la coordenada de un nucleón del proyectil relativo al centro de masas del mismo, $\vec{r}_t$ es la coordenada de un nucleón del blanco relativo al centro de masas del mismo y $\vec{s} = \vec{R} + \vec{r}_t - \vec{r}_p$. Aquí α denota los números cuánticos $\alpha \equiv \{L, n, j\}$ y el ket $|\Phi^{JM}_\alpha\rangle$ denota la función de onda

$$\Phi^{JM}_\alpha(\{\vec{x}_k, \vec{y}_k\}, \widehat{R}) = \left[\phi_{nj}(\{\vec{x}_k, \vec{y}_k\}) \otimes Y_L(\widehat{R})\right]_{JM}. \tag{1.90}$$

La densidad del estado fundamental de ^{12}C es

$$\rho^{(t)}_{g.s.}(\vec{r}_t) \equiv \langle \Psi^{(t)}_{g.s.} | \sum_{i=1}^{12} \delta(\vec{r}_t - \vec{r}_i) | \Psi^{(t)}_{g.s.} \rangle \tag{1.91}$$

y, por su parte, las densidades de transición de ^{6}He se definen como

$$\rho^{(p)J}_{\alpha,\alpha'}(\vec{r}_p, \widehat{R}) \equiv \langle \Phi^{JM}_\alpha | \sum_{i=1}^{6} \delta(\vec{r}_p - \vec{r}_i) | \Phi^{JM}_{\alpha'} \rangle. \tag{1.92}$$

En la ecuación (1.89), v_{nn} es una interacción efectiva nucleón-nucleón real. Por tanto, $V^J_{\alpha,\alpha'}$ no tiene parte imaginaria y por ello se multiplica por un factor $(N_R + iN_I)$,

$$(N_R + iN_I)V^J_{\alpha,\alpha'}(R), \tag{1.93}$$

con $N_R = 1$. En el artículo [132] se busca el parámetro N_I para reproducir la sección eficaz elástica lo mejor posible. A 18 MeV se tiene $N_I = 0{,}5$ y a 229,8 MeV $N_I = 0{,}3$.

Recientemente en la referencia [134] se menciona que Kamimura et al. han realizado un cálculo CDCC para la dispersión ^{6}He+^{209}Bi a 19,0 y 22,5 MeV teniendo en cuenta tanto los efectos de ruptura nuclear como coulombiana. En este artículo se comenta que las secciones eficaces se reproducen bien por el cálculo.

Yendo un paso más en complejidad, hay núcleos inestables que se consideran compuestos de cuatro cuerpos. Para reacciones en que uno de esos núcleos es el proyectil, se requiere un cálculo CDCC de cinco cuerpos. Un buen ejemplo se ve en un cálculo del sistema de cuatro nucleones (^{4}He) en la referencia [135].

En este apartado se ha descrito en detalle el método CDCC para el tratamiento de colisiones con acoplamiento al continuo. Dentro de él, se ha explicado tanto el método de discretización convencional de *bins* como el método de discretización PS usado más recientemente. Este procedimiento de tratamiento del continuo será aplicado en este trabajo usando otro método de discretización, el método del oscilador armónico transformado (THO) propuesto también en el trabajo.

***

Una vez presentadas las herramientas básicas para el desarrollo de esta tesis doctoral, se expone a continuación el esquema de este trabajo. En el capítulo 2 se trata el continuo con el método OP. Se discute en detalle el método particular THO y más brevemente el método TOP. El estudio se centra en la parte resonante del continuo de un problema de dos cuerpos con simetría esférica con el objetivo de obtener un estado normalizable que sea representativo de la resonancia. Para su aplicación se utiliza el potencial parametrizado de Ginocchio eligiendo dos casos comparativos, uno no resonante, el potencial de Pöschl-Teller, y otro resonante. La estructura de este capítulo es la siguiente, en el apartado 2.1

se presenta el método OP para discretizar el continuo para un problema de dos cuerpos con simetría esférica. En el apartado 2.2 se seleccionan los dos potenciales comparativos, uno sin resonancias, Pöschl-Teller, como referencia, y otro con resonancias. Finalmente, en el apartado 2.3 se busca cómo construir el estado resonante en la base discreta utilizada.

En el capítulo 3 se procede a la generalización del método THO para su aplicación a un sistema de tres cuerpos. Posteriormente el método se aplica al núcleo borromeo ^{6}He y se estudia la convergencia de diferentes observables de estructura en la base generada. La estructura de este capítulo es la siguiente, en el apartado 3.1 se explica la generalización del método THO. En el apartado 3.2 se aplica el método al núcleo borromeo ^{6}He. Finalmente, en el apartado 3.3 se estudia la convergencia de ciertas magnitudes de estructura como las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$.

A continuación en el capítulo 4 se procede al estudio de las reacciones que induce el núcleo borromeo ^{6}He, utilizando para ello el formalismo CDCC con el método de discretización THO. Para ello se hace el desarrollo multipolar del potencial de interacción proyectil-blanco para el caso concreto de un proyectil formado por tres partículas y después se utiliza el programa FRESCO para obtener los resultados de la dispersión por un núcleo pesado, ^{208}Pb. La estructura del capítulo es la siguiente, en el apartado 4.1 se presenta la función de onda de cuatro cuerpos. En el apartado 4.2 se formula el desarrollo multipolar del potencial de interacción entre el proyectil y el blanco. Finalmente, en el apartado 4.3 se estudia la reacción ^{6}He+^{208}Pb a 22 MeV utilizando para ello el programa FRESCO y los potenciales de acoplamiento obtenidos en el apartado anterior.

Finalmente en el capítulo 5 se presenta un resumen y conclusiones de todo el trabajo realizado. También hay tres apéndices matemáticos que recogen información necesaria para los capítulos 3 y 4. En el apéndice A se presentan las herramientas que se van a utilizar para el tratamiento de un sistema de tres cuerpos. En el apéndice B se presentan diversos desarrollos de álgebra de momentos angulares cuyos resultados se utilizan en el capítulo 3. Por último, en el apéndice C se hace un resumen del programa FaCE usado para generar la función de onda del estado fundamental del núcleo ^{6}He que se utiliza en el trabajo.

Capítulo 2

Tratamiento de resonancias

En este capítulo se va a tratar el continuo de un problema de dos cuerpos con simetría esférica con el método de polinomios ortogonales (Orthogonal Polynomial, OP). El estudio se va a centrar en la parte resonante del continuo con objeto de construir un estado normalizable que sea representativo de la resonancia. Para ello se van a utilizar dos potenciales comparativos, uno sin resonancias y otro con ellas. En el apartado 2.1 se introducirá el método OP para un problema de dos cuerpos con simetría esférica, explicando en detalle dos casos particulares, el método del oscilador armónico trasformado (Tranformed Harmonic Oscillator, THO) y el método de polinomios ortogonales en la variable trivial (Trivial Orthogonal Polynomial, TOP). En el apartado 2.2 se presentará una clase de potenciales resoluble analíticamente, el potencial de Ginocchio, que en función de los valores que tomen sus parámetros puede ser resonante o no. Por último, en el apartado 2.3 se mostrará cómo los métodos THO y TOP proporcionan una base discreta capaz de describir la parte resonante del continuo de energía, desarrollándose un procedimiento que permite obtener un estado normalizable que representa a la resonancia.

2.1. Método OP para sistemas de dos cuerpos con simetría esférica

Para el tratamiento del continuo de energía existen diferentes métodos de discretización entre los cuales se encuentran los métodos basados en familias de

polinomios ortogonales, OP. Éstos proporcionan una base discreta, completa y ortonormal de estados que se utilizan como una descripción tanto de los estados ligados como del continuo de energía. La condición que se impone para generar esta base es reproducir correctamente el comportamiento del estado fundamental ligado. Dentro de este método general hay una gran diversidad de casos particulares.

En el apartado 1.4 de la introducción se han presentado las características generales del método OP para el caso de 1 dimensión. Aquí se va a generalizar para el problema de dos cuerpos con simetría esférica, por lo tanto, se va a trabajar en 3 dimensiones (3D). Como se va a tratar el caso de potenciales en 3D con simetría esférica, $V(\vec{r}) = V(r)$ donde r es la coordenada relativa entre las dos partículas que experimentan la interacción. Una base ortonormal genérica, $\{\Psi_{nlm_l}(\vec{r})\}$, se puede expresar como

$$\Psi_{nlm_l}(\vec{r}) = R_{nl}(r)\, Y_{lm_l}(\hat{r}), \tag{2.1}$$

donde $\{Y_{lm_l}(\hat{r})\}$ son los armónicos esféricos que cumplen la relación de ortonormalidad

$$\int d\hat{r} Y_{lm_l}(\hat{r})^* Y_{l'm'_l}(\hat{r}) = \delta_{ll'}\delta_{m_l m'_l} \quad \forall l, l', m_l, m'_l, \tag{2.2}$$

mientras la parte radial de la función de onda, $R_{nl}(r)$, cumple

$$\int_0^\infty dr\, r^2 R_{nl}(r)\, R_{n'l}(r) = \delta_{nn'} \quad \forall n, n', l, \tag{2.3}$$

verificándose de esta forma la relación de ortonormalidad completa

$$\int d\vec{r}\ \Psi_{nlm_l}(\vec{r})^*\, \Psi_{n'l'm'_l}(\vec{r}) = \delta_{nn'}\delta_{ll'}\delta_{m_l m'_l} \quad \forall n, n', l, l', m_l, m'_l. \tag{2.4}$$

Si se define la función de onda radial como

$$\psi_{nl}(r) = r R_{nl}(r), \tag{2.5}$$

la condición (2.3) queda

$$\int_0^\infty dr\ \psi_{nl}(r)\, \psi_{n'l}(r) = \delta_{nn'} \quad \forall n, n', l. \tag{2.6}$$

Como además en este capítulo se va a considerar el caso particular $l = 0$, aunque el método se puede generalizar a los casos con $l > 0$, se denominará entonces

$$\psi_n(r) \equiv \psi_{nl=0}(r). \tag{2.7}$$

En el apartado 1.4 de la introducción se ha realizado una explicación detallada del método general OP y se han explicado las dos posibilidades dentro del método general. A continuación se van a presentar los casos particulares, método del oscilador armónico transformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO) y método de polinomios ortogonales en la variable trivial (Trivial Orthogonal Polynomial, TOP), como ejemplos de las dos posibilidades dentro del método general pero con las peculiaridades de un problema en 3D.

2.1.1. Método del oscilador armónico transformado (THO)

En este método se fija como familia de polinomios ortogonales la relacionada con la base del oscilador armónico (Harmonic Oscillator, HO) en 3D. Dicha base es la siguiente

$$\phi_n^{HO}(s) = C_n L_n^{1/2}\left(s^2\right) s \exp\left(-s^2/2\right), \tag{2.8}$$

donde $\left(L_n^{1/2}\right)_n$ es la familia de polinomios[1] generalizados de Laguerre con $\alpha = 1/2$ y C_n es la constante de normalización,

$$C_n = \sqrt{\frac{2\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+3/2)}}. \tag{2.9}$$

Es útil definir la base y la constante de normalización como

$$\phi_n^{HO}(s) = N_n \phi_0^{HO}(s) L_n^{1/2}\left(s^2\right), \tag{2.10}$$

$$N_n = \frac{C_n}{C_0} = \sqrt{\frac{\pi^{1/2}\Gamma(n+1)}{2\Gamma(n+3/2)}}. \tag{2.11}$$

De manera que la familia de polinomios relevante es la generalizada de Laguerre con $\alpha = 1/2$, $\left(L_n^{1/2}\right)_n$, cuya variable natural t está relacionada con la variable s del HO como

$$t(s) = s^2. \tag{2.12}$$

Esta familia es ortogonal respecto a la medida

$$d\mu(t) = C dt\, t^{1/2} \exp(-t), \tag{2.13}$$

donde

$$C = C_0^2/2 = 2/\pi^{1/2}. \tag{2.14}$$

[1] $\left(L_n^{1/2}\right)_n \equiv \{L_n^{1/2}, n = 0, \ldots, \infty\}$

Si se hace el cambio de variable a la variable del HO, la medida queda

$$d\mu\left(s\right)=2Cds\,s^{2}\exp(-s^{2})=ds|\phi_{0}^{HO}\left(s\right)|^{2}. \tag{2.15}$$

De esta manera, teniendo en cuenta la expresión (1.21) de la medida, se obtiene la relación

$$dr|\psi_{B}\left(r\right)|^{2}=ds|\phi_{0}^{HO}\left(s\right)|^{2} \tag{2.16}$$

la cual permite obtener la función $s\left(r\right)$. De aquí se deduce que el método se puede interpretar como aquél que transforma el estado fundamental de sistema, en la variable física r, en el estado fundamental de un oscilador armónico simple, en la variable s. Así, la ecuación que nos permite calcular la transformación local de escala (Local-Scaling point Transformation, LST), $s\left(r\right)$, es

$$\int_{0}^{r}dr'|\psi_{B}\left(r'\right)|^{2}=\int_{0}^{s}ds'|\phi_{0}^{HO}\left(s'\right)|^{2}. \tag{2.17}$$

Una vez obtenida la LST, la base THO se obtiene aplicando esta transformación $s\left(r\right)$ a la base HO, obteniéndose

$$\psi_{n}^{THO}\left(r\right)=\sqrt{\frac{ds}{dr}}\phi_{n}^{HO}\left(s\left(r\right)\right), \tag{2.18}$$

y expresando la base HO en función de la familia de polinomios

$$\begin{aligned}\psi_{n}^{THO}\left(r\right)&=N_{n}\sqrt{\frac{ds}{dr}}\phi_{0}^{HO}\left(s\left(r\right)\right)L_{n}^{1/2}\left(t\left(r\right)\right)\\&=N_{n}\psi_{B}\left(r\right)L_{n}^{1/2}\left(t\left(r\right)\right).\end{aligned} \tag{2.19}$$

Como se puede observar sólo se ha necesitado conocer la función de onda del estado fundamental del sistema para obtener la LST, $s\left(r\right)$, y por tanto la base buscada.

2.1.2. Método de polinomios ortogonales en la variable trivial (TOP)

En este método se fija la LST, $s\left(r\right)$, al caso particular más simple. Como $s(r)$ debe ser una función analítica de x, y y z, se toma trivialmente $s\left(r\right)=x^{2}+y^{2}+z^{2}=r^{2}$ ya que $s(r)=r=\sqrt{x^{2}+y^{2}+z^{2}}$ no es analítica en el origen

respecto a x ,y y z. Una vez fijada la LST, se genera la familia de polinomios ortogonales respecto a la medida dada, según la ecuación (1.21), por

$$d\mu(s) = ds\frac{1}{2\sqrt{s}}|\psi_B(r(s))|^2, \tag{2.20}$$

donde

$$r(s) = +\sqrt{s} \tag{2.21}$$

ya que $r \geq 0$. Nótese que $\psi_B(r(s)) = r(s)R_0(r(s)) = \sqrt{s}R_0(r(s))$ y $R_0(r)$ es, en general, una función par en r. Cabe resaltar que esta familia no será en general una de las clásicas porque su medida no coincidirá normalmente con las medidas de las familias clásicas.

En este caso la condición de ortogonalidad (1.20) de la familia de polinomios queda

$$\int_{s(0)}^{s(\infty)} ds\frac{1}{2\sqrt{s}}|\psi_B(r(s))|^2 P_n^{TOP}(s) P_m^{TOP}(s) = 0 \quad n \neq m. \tag{2.22}$$

Esta condición permitirá obtener la familia de polinomios ortogonales. Como los polinomios se pueden expresar de la forma

$$P_n^{TOP}(s) = \sum_{p=0}^{n} C_{np} s^p, \tag{2.23}$$

lo más sencillo es obtener los polinomios mónicos, es decir, aquéllos que cumplen $C_{nn} = 1\ \forall n$. De esta manera, para cada polinomio de orden n se obtiene el resto de n coeficientes con las n ecuaciones que se tienen a partir de la condición de ortogonalidad respecto a los polinomios de orden $m < n$ de la forma siguiente

$$\sum_{p=0}^{n-1}\sum_{l=0}^{m-1} C_{np}C_{ml}\langle s^{p+l}\rangle + \sum_{l=0}^{n-1} C_{ml}\langle s^{n+l}\rangle + \sum_{p=0}^{n-1} C_{np}\langle s^{p+m}\rangle + \langle s^{n+m}\rangle = 0, \tag{2.24}$$

donde $\langle s^p\rangle$ es el momento de s de orden p

$$\langle s^p\rangle = \int_{s(0)}^{s(\infty)} d\mu(s)\, s^p. \tag{2.25}$$

Así para cada n se tiene $m = 0, \ldots, n-1$, por lo tanto, n ecuaciones con n incógnitas $\{C_{np}, p = 0, \ldots, n-1\}$ ya que los coeficientes $\{C_{ml}, l = 0, \ldots, m -$

$1, m = 0, \ldots, n-1\}$ han sido determinados con anterioridad. Se presentan a continuación los primeros polinomios:

$$P_0^{TOP}(s) = 1, \tag{2.26}$$

$$P_1^{TOP}(s) = s - \langle s \rangle, \tag{2.27}$$

$$P_2^{TOP}(s) = s^2 + \frac{\langle s \rangle \langle s^2 \rangle - \langle s^3 \rangle}{\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2} s - \frac{\langle s^2 \rangle^2 + \langle s \rangle \langle s^3 \rangle}{\langle s^2 \rangle - \langle s \rangle^2}. \tag{2.28}$$

Una vez obtenida la familia de polinomios ortogonales, la base TOP se obtiene como

$$\psi_n^{TOP}(r) = M_n \psi_B(r) P_n^{TOP}(r^2) \tag{2.29}$$

donde M_n es la constante de normalización que se obtiene con la condición de normalización (1.23) que para este caso resulta

$$M_n^2 \int_{s(0)}^{s(\infty)} ds \frac{1}{2\sqrt{s}} |\psi_B(r(s))|^2 \left(P_n^{TOP}(s)\right)^2 = 1 \quad \forall n. \tag{2.30}$$

Como se puede observar, igual que en el método THO, sólo se necesita conocer la función de onda del estado fundamental para obtener los coeficientes de los polinomios y, por tanto, la base buscada.

En este apartado se ha introducido, para un sistema de dos cuerpos con simetría esférica, el método de polinomios ortogonales OP para la discretización del continuo, detallándose dos casos particulares, THO y TOP. Se ha mostrado cómo este método genera una base discreta, completa y ortonormal de estados, siendo únicamente necesario conocer la función de onda del estado fundamental ligado del sistema.

2.2. Potencial de Ginocchio

En este apartado se presenta el potencial utilizado en este capítulo, el potencial de Ginocchio, que es una familia de potenciales muy flexible que permite, con la elección adecuada de los parámetros, modelar formas de potenciales de interés. Un análisis matemático detallado del potencial se encuentra recogido en el trabajo de investigación [137]. Aquí se analizan las características fundamentales del mismo y

se eligen dos casos particulares dentro de la familia, un potencial que no presenta resonancias, como referencia, y otro que sí las presenta.

La ecuación radial de Schrödinger para el potencial de Ginocchio, $W_l(R)$, es

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2}\frac{d}{dR}\frac{1}{M(R)}\frac{d}{dR}+\frac{\hbar^2}{2}\frac{1}{M(R)}\frac{l(l+1)}{R^2}+W_l(R)\right]\Psi_{nl}(R)=E_{nl}\Psi_{nl}(R), \tag{2.31}$$

donde R es la coordenada radial relativa, l es el momento angular relativo, $M(R)$ es la masa efectiva, $\Psi_{nl}(R)$ son las funciones de onda radiales y E_{nl} son las energías.

Como en este capítulo se va a considerar el caso particular $l=0$, se denominará entonces

$$f=f_{l=0} \tag{2.32}$$

siendo f cualquier función que dependa de l. Además se va a considerar el caso en el cual $M(R)=m$, siendo m la masa reducida del sistema. Si ahora se escribe el potencial $W(R)$ en términos de un potencial adimensional $v(r)$

$$W(R)=Vv(r), \tag{2.33}$$

donde V es la intensidad del potencial en unidades de energía, y se define una escala en unidades de longitud,

$$\mathcal{S}=\left(\frac{\hbar^2}{2mV}\right)^{1/2}, \tag{2.34}$$

la ecuación radial de Schrödinger adimensional para $l=0$ queda

$$\left[-\frac{d^2}{dr^2}+v(r)\right]\psi_n(r)=\varepsilon_n\psi_n(r), \tag{2.35}$$

donde la relación de las magnitudes adimensionales con sus correspondientes dimensiones es para la coordenada radial, r,

$$R=\mathcal{S}r, \tag{2.36}$$

la función de onda, $\psi_n(r)$,

$$\psi_n(r)=\mathcal{S}^{1/2}\Psi_n(\mathcal{S}r), \tag{2.37}$$

y la energía, ε_n,

$$\varepsilon_n=\frac{E_n}{V}. \tag{2.38}$$

El potencial $v(r)$ tiene la forma

$$v(r) = -\lambda^2 \nu (\nu+1)(1-y^2) + \left(\frac{1-\lambda^2}{4}\right)(1-y^2) \times \left(2 - (7-\lambda^2) y^2 + 5(1-\lambda^2) y^4\right), \tag{2.39}$$

donde se introduce la función $y(r)$, que es una variable útil para definir el potencial y que se define implícitamente por la ecuación

$$r(y) = \frac{1}{\lambda^2}\left[\operatorname{arctanh}(y) + \left[\lambda^2 - 1\right]^{1/2} \arctan\left(\left[\lambda^2 - 1\right]^{1/2} y\right)\right], \tag{2.40}$$

con $0 \leq y \leq 1$. La relación inversa, $y(r)$, no se puede obtener, en general, analíticamente. Aunque el comportamiento asintótico es

$$y \to r \text{ para } r \to 0 \tag{2.41}$$

y

$$y \to 1 - 2\exp\left[-2\lambda^2 (r - r_0)\right] \text{ para } r \to \infty, \tag{2.42}$$

donde

$$r_0 = \frac{\left[\lambda^2 - 1\right]^{1/2}}{\lambda^2} \arctan\left(\left[\lambda^2 - 1\right]^{1/2}\right). \tag{2.43}$$

Por otra parte los parámetros del potencial son:

- *parámetro de profundidad del potencial*, ν, determina el número de estados ligados y puede tomar los valores

$$0 \leq \nu < \infty; \tag{2.44}$$

- *parámetro de forma*, λ, determina la forma del potencial y puede tomar los valores

$$0 < \lambda < \infty. \tag{2.45}$$

Las soluciones de la ecuación (2.35) con el potencial (2.39) se conocen analíticamente. Estas se dividen en soluciones discretas, es decir, con autovalores que toman valores discretos y soluciones continuas, es decir, con autovalores que forman un continuo. A continuación se discute cada una de estas soluciones.

2.2.1. Estados discretos: ligados, ligados virtuales, virtuales y resonantes

La función de onda para los estados discretos, que son solución de la ecuación (2.35), es

$$\psi_n(r) = N_n 2^{-1/4}[1+\lambda^2-(1-\lambda^2)\,x(y)]^{1/4} \times \left(\frac{1+x(y)}{2}\right)^{\frac{\beta_n}{2}} \left(\frac{1-x(y)}{2}\right)^{1/2} P_n^{1/2,\beta_n}(x(y)) \tag{2.46}$$

con energía

$$\varepsilon_n = -\lambda^4\beta_n^2 = k_n^2, \tag{2.47}$$

donde $P_n^{1/2,\beta_n}(x)$ es el polinomio de Jacobi de orden n, k_n es el momento asintótico y

$$N_n = \left(\frac{2\lambda^2 n!\Gamma(\beta_n+n+3/2)\,\beta_n\,[\beta_n+2n+3/2]}{\Gamma(n+3/2)\,\Gamma(\beta_n+n+1)\,[\beta_n\lambda^2+2n+3/2]}\right)^{1/2}, \tag{2.48}$$

$$\beta_n = \frac{1}{\lambda^2}\left[\pm\left[(2n+3/2)^2(1-\lambda^2)+\lambda^2(\nu+1/2)^2\right]^{1/2}-(2n+3/2)\right] = -\frac{ik_n}{\lambda^2} \tag{2.49}$$

$$x(y) = \frac{1-(1+\lambda^2)\,y^2}{1-(1-\lambda^2)\,y^2}, \tag{2.50}$$

con $1 \geq x \geq -1$ para $0 \leq y \leq 1$.

Los momentos, k_n, de estas soluciones se corresponden con los polos de la matriz de dispersión S, $S(k)$. En función del valor del momento, los estados discretos se dividen en cuatro tipos, tal como se muestra en la figura 2.1, que son los siguientes:

- *estado ligado*: k_n imaginario puro y positivo $\Leftrightarrow$ β_n real y positiva: es un estado normalizable con ε_n real y negativa;
- *estado ligado virtual*: k_n imaginario puro y negativo $\Leftrightarrow$$\beta_n$ real y negativa: es un estado no normalizable con ε_n real y negativa;
- *estado virtual*: k_n complejo con $\mathrm{Re}^2[k_n] < \mathrm{Im}^2[k_n] \Leftrightarrow \beta_n$ compleja con $\mathrm{Re}^2[\beta_n] > \mathrm{Im}^2[\beta_n]$: es un estado no normalizable con ε_n compleja y $\mathrm{Re}[\varepsilon_n] < 0$;

- *estado resonante*: k_n complejo con $\mathrm{Re}^2[k_n] > \mathrm{Im}^2[k_n] \Leftrightarrow \beta_n$ compleja y $\mathrm{Re}^2[\beta_n] < \mathrm{Im}^2[\beta_n]$: es un estado no normalizable con ε_n compleja y $\mathrm{Re}[\varepsilon_n] > 0$.

Aunque todas son soluciones matemáticas de la ecuación de Schrödinger, los estados que pertenecen al espacio de Hilbert del sistema son sólo los estados ligados porque son los únicos cuya función de onda no diverge.

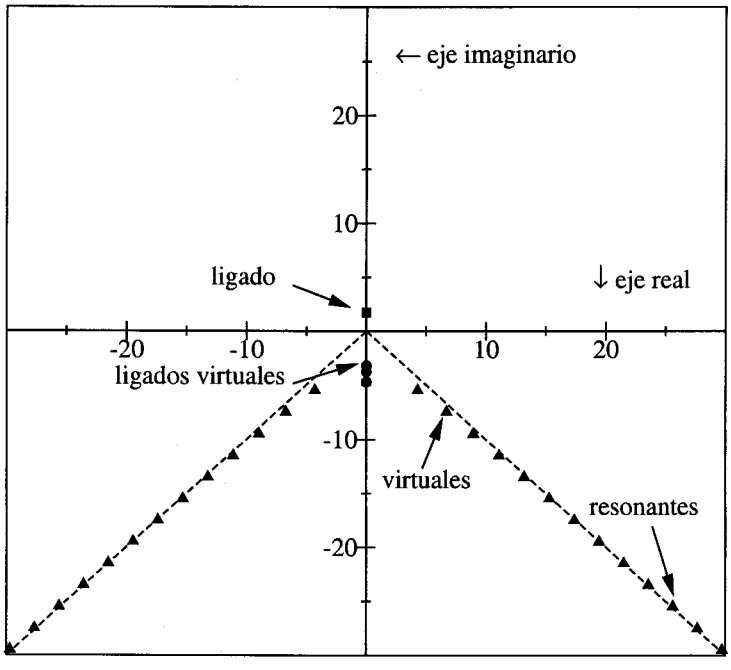


Figura 2.1: *Polos de la matriz de dispersión en el plano complejo de momentos para un caso particular del potencial de Ginocchio que presenta los cuatro tipos de estados discretos. Las líneas discontinuas son las bisectrices de los cuadrantes correspondientes y son la frontera que separa los estados virtuales y los resonantes.*

Para los estados con energía compleja se puede expresar

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^r \pm i\Gamma_n/2, \tag{2.51}$$

siendo la energía

$$\varepsilon_n^r = -\lambda^2 (\nu + 1/2)^2 + (\lambda^2 - 2)(2n + 3/2)^2 \tag{2.52}$$

y su anchura

$$\Gamma_n = 2(4n + 3)\,|\lambda^2 (\nu + 1/2)^2 + (1 - \lambda^2)(2n + 3/2)^2\,|^{1/2}. \tag{2.53}$$

Las dos funciones de onda de los estados cuyas energías vienen dadas por (2.51), para n fijo, son complejas conjugadas y como la correspondiente al signo + diverge temporalmente, sólo se considera la correspondiente al signo −.

2.2.2. Estados del continuo

La función de onda regular en el origen de los estados del continuo, que son solución de la ecuación (2.35), es

$$\begin{aligned}\psi_k(r) = \chi_k(r) &\left(\frac{1+x(y)}{2}\right)^{\overline{\beta}/2} \\ &\times F\left(\frac{3/2+\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}, \frac{3/2+\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}; 3/2; \frac{1-x(y)}{2}\right),\end{aligned} \tag{2.54}$$

con energía

$$\varepsilon = -\lambda^4\overline{\beta}^2 = k^2, \tag{2.55}$$

donde $F(a,b;c;z)$ es la función hipergeométrica, k es el momento asintótico y

$$\chi_k(r) = \left(1+\lambda^2-\left(1-\lambda^2\right)x(y)\right)^{1/4}\left(\frac{1-x(y)}{2}\right)^{1/2}, \tag{2.56}$$

$$\overline{\nu} = \left((\nu+1/2)^2+\overline{\beta}^2\left(1-\lambda^2\right)\right)^{1/2}, \tag{2.57}$$

$$\overline{\beta} = -ik/\lambda^2. \tag{2.58}$$

Pero esta expresión sólo es válida cerca del origen porque es donde converge la función hipergeométrica de $(1-x(y))/2$, mientras que para r grande interesa esta otra expresión, combinación de las funciones de onda entrante y saliente,

$$\begin{aligned}\psi_k(r) = \chi_k(r) &\left(\frac{1+x(y)}{2}\right)^{\overline{\beta}/2} \frac{\Gamma(3/2)\,\Gamma\left(-\overline{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3/2-\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3/2-\overline{\beta}+\overline{\nu}}{2}\right)} \\ &\times F\left(\frac{3/2+\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}, \frac{3/2+\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}; 1+\overline{\beta}; \frac{1+x(y)}{2}\right) \\ &+ \chi_k(r)\left(\frac{1+x(y)}{2}\right)^{-\overline{\beta}/2} \frac{\Gamma(3/2)\,\Gamma\left(\overline{\beta}\right)}{\Gamma\left(\frac{3/2+\overline{\beta}+\overline{\nu}}{2}\right)\Gamma\left(\frac{3/2+\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}\right)} \\ &\times F\left(\frac{3/2-\overline{\beta}+\overline{\nu}}{2}, \frac{3/2-\overline{\beta}-\overline{\nu}}{2}; 1-\overline{\beta}; \frac{1+x(y)}{2}\right)\end{aligned} \tag{2.59}$$

que converge para r grande y que se obtiene simplemente con la relación que existe entre la función hipergeométrica de z y $(1-z)$

$$\begin{aligned} F(a,b;c;z) = & \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} F(a,b;a+b-c+1;1-z) + \\ & + (1-z)^{(c-a-b)} \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} \\ & \times F(c-a,c-b;c-a-b+1;1-z). \end{aligned} \tag{2.60}$$

Para elegir una normalización adecuada para las funciones de onda del continuo, que no se pueden normalizar a la unidad, se elige el criterio de que cumplan la relación de cierre

$$\int dk\ \psi_k(r)^*\,\psi_k(r') = \delta(r-r'), \tag{2.61}$$

lo cual se cumple si

$$\psi_k(r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\cos(kr+\delta) \text{ para } r \to \infty. \tag{2.62}$$

2.2.3. Casos particulares

Dentro de la clase de estudio, los potenciales presentan distintas formas y distintos tipos de los estados discretos, explicados en el subapartado 2.2.1, en función del valor de los parámetros λ y ν como se explica detalladamente en el trabajo de investigación [137]. En particular, los potenciales no presentan estados con energía compleja para $\lambda \leq 1$ mientras presentan una barrera de potencial para $\lambda > \lambda_b(\nu) > 1$, donde $\lambda_b(\nu)$ viene dada por

$$\lambda_b(\nu) = \left(1+\nu+\nu^2\right)^{1/2} > 1\ \forall\nu, \tag{2.63}$$

y estados resonantes para $\lambda > \sqrt{2}$.

Como el objetivo de este trabajo es el estudio de los estados resonantes que presentan determinados potenciales, dentro de esta gama se elegirá un potencial que presente estados resonantes. Como referencia para contrastar los resultados, se elegirá otro potencial que no presente este tipo de estados. Ambos potenciales, resonante y no resonante, se pueden elegir con un determinado número de estados ligados en función del valor del parámetro ν. Para este estudio lo más práctico es elegir dicho parámetro de forma que los potenciales tengan un único estado ligado, para maximizar de esta forma el efecto del continuo.

Potencial sin resonancias: Pöschl-Teller

Dentro de la clase considerada, el potencial de Pöschl-Teller (PT) en 3D se obtiene como un caso particular del potencial de Ginocchio, concretamente para $\lambda = 1$,

$$v(r) = -\frac{\nu(\nu+1)}{\cosh^2(r)}, \tag{2.64}$$

donde el valor de ν determinará el número de estados ligados, como ya se ha comentado. Además en este caso la relación entre las variables r e y es más sencilla, pudiéndose obtener analíticamente la relación inversa,

$$r = \operatorname{arctanh}(y), \tag{2.65}$$

$$y = \tanh(r). \tag{2.66}$$

Este potencial ampliamente conocido no presenta resonancias, por lo que se puede tomar como modelo de potencial no resonante. El valor de ν se elegirá de tal manera que el potencial tenga un único estado ligado[2], $n = 0$, para maximizar el efecto del continuo. La discusión de esta condición se realiza en el trabajo de investigación [137] y entre los valores posibles de ν se toma $\nu = 2$. De esta manera el potencial tiene un único estado ligado con energía $e_B = \varepsilon_0 = -1$.

En la figura 2.2 se muestran los distintos tipos de estados discretos que presenta el potencial PT, representados como los polos de la matriz de dispersión S, $S(k)$, al igual que para el caso general ya presentado en la figura 2.1. En este caso, como $\lambda = 1$, no hay estados con energía compleja y por lo tanto sólo hay estados ligados y ligados virtuales. En el caso concreto de $\nu = 2$ hay un único estado ligado e infinitos estados ligados virtuales. Las funciones de onda de estos últimos son funciones reales que divergen exponencialmente.

La función de onda del estado fundamental del potencial PT se obtiene particularizando la ecuación (2.46) para $n = 0$, $\lambda = 1$ y $\nu = 2$. Como además para el PT se conoce la relación explítica $y(r)$, dada por la ecuación (2.66), se puede obtener analíticamente la función de onda expresada en la variable r de una forma sencilla

$$\psi_0^{PT}(r) = \sqrt{3}\frac{\tanh(r)}{\cosh(r)}. \tag{2.67}$$

[2]De las dos soluciones posibles para cada valor de n, correspondientes a los dos signos de β_n en la ecuación (2.49), sólo el correspondiente al signo + puede ser ligado.

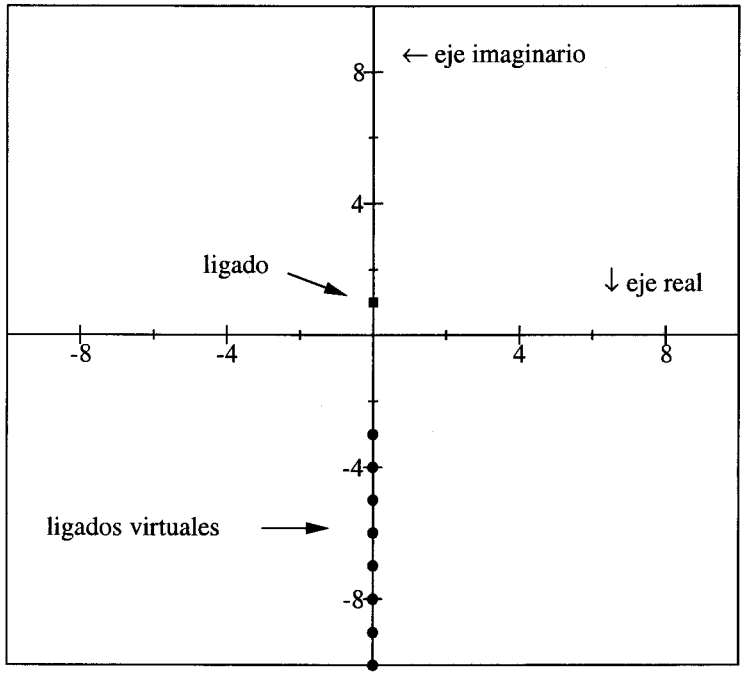


Figura 2.2: *Polos de la matriz de dispersión en el plano complejo de momentos para el potencial de Pöschl-Teller* ($\lambda = 1$ *y* $\nu = 2$).

Así en la figura 2.3 se presenta tanto el potencial PT como la función de onda de su estado fundamental.

Potencial con resonancias

Como modelo de potencial resonante, conviene elegir uno que cumpla una serie de características tales que se optimice el estudio del primer estado resonante, en el que se centrará el presente trabajo. Para ello se van a exigir las siguientes condiciones:

1. tener un único estado ligado, $n = 0$,
2. tener el siguiente estado discreto, $n = 1$, como primer estado resonante,
3. tener un único estado resonante por debajo de la barrera,
4. tener una relación entre anchura y energía de la resonancia menor que la unidad.

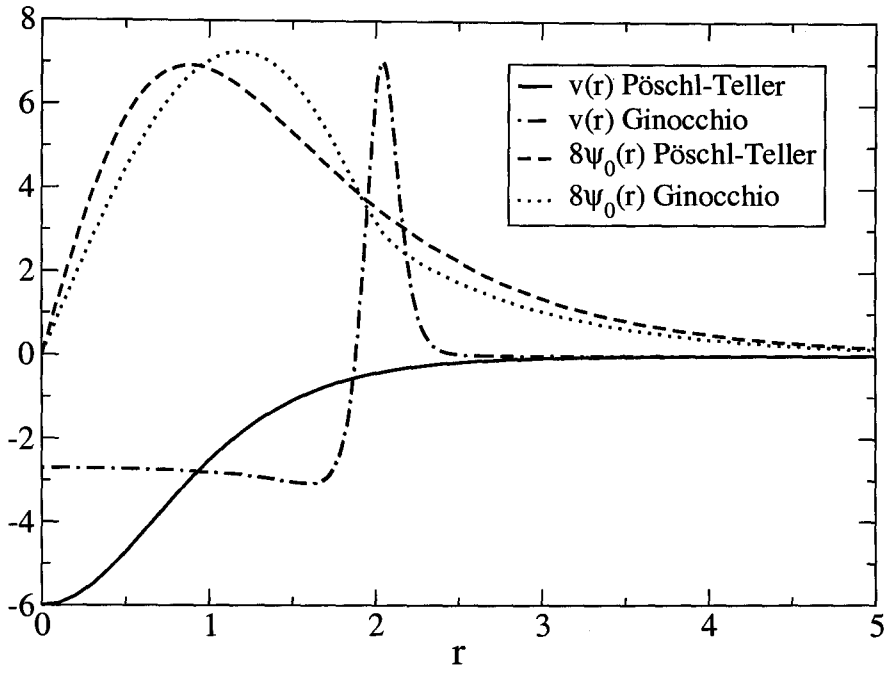


Figura 2.3: *Potencial de Pöschl-Teller ($\lambda = 1$ y $\nu = 2$) y de Ginocchio ($\lambda = 10$ y $\nu = 1{,}58$), junto con las correspondientes funciones de onda del estado fundamental. Las funciones de onda se han multiplicado por 8 para mostrarlas en la misma figura que los potenciales.*

La primera condición se impone para maximizar el efecto del continuo al igual que en el caso no resonante. Las siguientes condiciones se exigen para garantizar la existencia de una resonancia bien definida y aislada. En particular, la última es conveniente imponerla para poder hablar propiamente de resonancias como se comenta en la referencia [59]. Al potencial de Ginocchio que cumpla estas características se le denominará caso G.

Además como se va a realizar la comparación con el potencial PT es conveniente que se cumpla la relación

$$\varepsilon_0^{PT}\langle r^2\rangle_0^{PT} = \varepsilon_0^{G}\langle r^2\rangle_0^{G}, \tag{2.68}$$

donde $\langle r^2\rangle_0$ es el cuadrado del radio cuadrático medio en el estado fundamental.

La discusión de estas cinco condiciones se realiza en el trabajo de investigación [137] y según esta se eligen los parámetros $\lambda = 10$ y $\nu = 1{,}58$. Con ello se garantizan las cuatro condiciones que se requerían para el potencial resonante y

la relación (2.68) entre los potenciales resonante y no resonante.

Por último y con el objetivo de hacer una comparación razonable con el potencial no resonante PT, se procederá a reescalar el potencial resonante G de manera que la energía y el radio cuadrático medio del estado ligado coincidan con los de PT. Como ya se ha impuesto que el producto de ambos, energía y radio cuadrático medio, sean iguales para ambos potenciales, basta con imponer que las energías sean iguales. Así se define un parámetro de escala α tal que

$$\varepsilon_0^{PT} = \alpha^{-2}\varepsilon_0^G = e_B = -1, \tag{2.69}$$

resultando

$$\alpha = \sqrt{-\varepsilon_0^G} = 12{,}99. \tag{2.70}$$

Así, con este cambio de escala las magnitudes reescaladas se expresan en función de las antiguas, denotadas por $(')$, como sigue:

$$r = r'\alpha, \tag{2.71}$$

$$\varepsilon = \alpha^{-2}\varepsilon', \tag{2.72}$$

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{\alpha}}\psi'(r/\alpha). \tag{2.73}$$

En la figura 2.4 se muestran los distintos tipos de estados discretos que presenta el potencial G, representados de nuevo como los polos de la matriz de dispersión S, $S(k)$. En este caso, como $\lambda > \sqrt{2}$, hay estados con energía compleja pero como se ha impuesto que el estado $n = 1$ sea resonante no hay estados virtuales. Como se puede ver en la figura 2.4 hay un único estado ligado, otro estado ligado virtual[3] e infinitos estados resonantes. La función de onda del primer estado resonante $n = 1$, con energía $\varepsilon_1^r = 4{,}55$ y anchura $\Gamma_1 = 2{,}32$, se presenta en la figura 2.5, representándose tanto su parte real como su parte imaginaria. Puede verse cómo esta función de onda diverge fuera de la barrera del potencial G, oscilando conforme $r \to \infty$.

Por otra parte, la función de onda del estado fundamental del potencial G se obtiene particularizando de nuevo la ecuación (2.46) para $n = 0$, $\lambda = 10$ y $\nu = 1{,}58$, pero en este caso no se puede obtener una expresión analítica en función de r porque ahora no se conoce analíticamente la función $y(r)$ como en

[3]Es la solución de $n = 0$, correspondiente al signo $-$ de β_n en la ecuación (2.49)

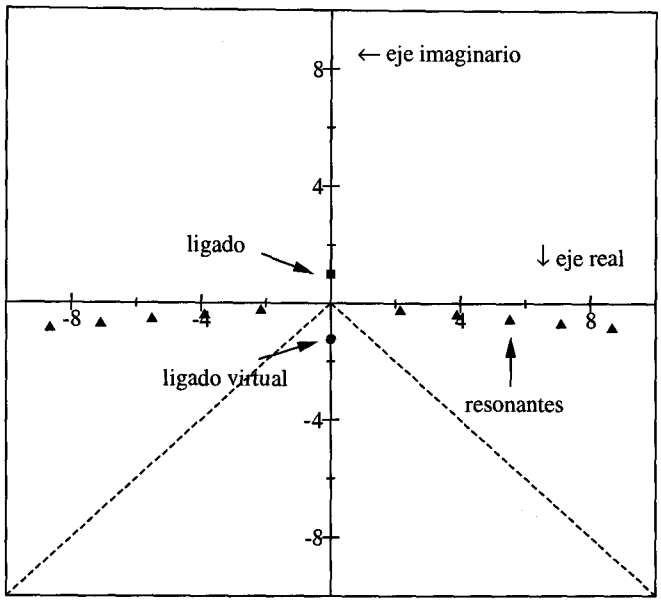


Figura 2.4: *Polos de la matriz de dispersión en el plano complejo de momentos para el potencial de Ginocchio ($\lambda = 10$ y $\nu = 1{,}58$). Las líneas discontinuas son las bisectrices de los cuadrantes correspondientes y son la frontera que separaría los estados virtuales y los resonantes.*

el caso PT. No obstante, para $r \to \infty \Leftrightarrow y \to 1$, la variable y no es adecuada como se explica en el trabajo de investigación [137] y es necesario obtener una expresión asintótica de las funciones de onda en función de r, que para los estados discretos viene dada por la ecuación

$$\psi_n(r) = \exp[ik_n r]\mathcal{F}_n(y), \tag{2.74}$$

donde $\mathcal{F}_n(y)$ es una función suave de y que para y_c suficientemente próximo a 1 es prácticamente constante. De nuevo la función de onda del estado fundamental del potencial G, para $r \to \infty$, se obtiene particularizando la ecuación (2.74) para $n = 0$, $\lambda = 10$ y $\nu = 1{,}58$. El parámetro y_c es, para el caso G, $y_c \approx 0{,}99$. En la figura 2.3 se presenta tanto el potencial G como la función de onda de su estado fundamental.

En este apartado se ha presentado una clase de potenciales resoluble analíticamente, el potencial de Ginocchio, que en función de los valores que tomen sus

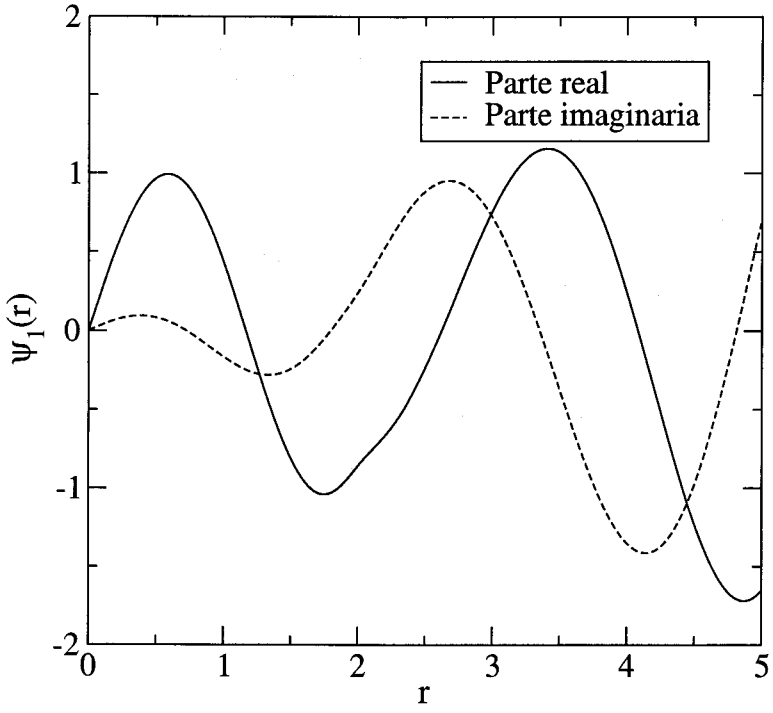


Figura 2.5: *Función de onda del primer estado resonante del potencial de Ginocchio* ($\lambda = 10$ *y* $\nu = 1{,}58$).

parámetros puede presentar resonancias o no. Se han elegido dos casos particulares, uno sin resonancias, PT, y otro con resonancias, G. En el próximo apartado se hará una comparación entre ambos potenciales aplicando los métodos de discretización, THO y TOP, explicados en el apartado anterior.

2.3. Descripción de la resonancia en una base discreta

En este apartado se va a aplicar el método del oscilador armónico transformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO), explicado en el apartado 2.1, a los dos casos particulares del potencial de Ginocchio establecidos en el apartado 2.2; uno de ellos no resonante, el potencial de Pöschl-Teller (PT) ($\lambda = 1$) con $\nu = 2$, y el otro resonante, potencial de Ginocchio (G) con $\lambda = 10$ y $\nu = 1{,}58$. Éstos se han elegido de tal manera que presenten un único estado ligado a la misma energía $e_B = -1$ y el mismo radio cuadrático medio 1,35. En la figura 2.3 se presentan

ambos potenciales.

El procedimiento que se seguirá en este apartado es el siguiente, primero se generará la base THO para lo cual hay que calcular la transformación local de escala (Local-Scaling point Transformation, LST), $s(r)$, que transforma el estado fundamental del sistema, en la variable física r, en el estado fundamental del oscilador armónico (Harmonic Oscillator, HO), en una variable s, y aplicar esta LST a la base HO. Después se diagonalizará el hamiltoniano del sistema en una base THO con un número finito, N, de estados excitados estudiando la convergencia de los resultados conforme aumenta N. A continuación se hará una búsqueda de la resonancia determinándose un procedimiento para discernirla del continuo no resonante en una base THO finita.

Por último, se presentará más brevemente la aplicación del método de polinomios ortogonales en la variable trivial (Trivial Orthogonal Polynomial, TOP), explicado también en el apartado 2.1, a los mismos potenciales. En este caso para generar la base TOP se calculará la familia de polinomios, expresados en la variable $s(r) = r^2$, que son ortogonales respecto al cuadrado de la función de onda del estado fundamental del sistema.

2.3.1. Construcción de la base discreta con el método THO

Para aplicar el método THO el primer paso es calcular la LST y para ello sólo se necesita conocer la función de onda del estado fundamental del sistema. En el caso del potencial de Ginocchio esta se conoce analíticamente y para los casos particulares considerados, PT y G, están representadas en la figura 2.3.

A partir de la función de onda del estado fundamental, la LST se obtiene mediante la ecuación (2.17) donde $\psi_B(r)$ es la función de onda del estado fundamental ligado del sistema,

$$\psi_B(r) = \psi_0(r), \tag{2.75}$$

y $\phi_0^{HO}(s)$ es la función de onda del estado fundamental del HO que, particularizando la ecuación (2.8) para $n = 0$, es

$$\phi_0^{HO}(s) = \frac{2}{\pi^{1/4}} s \exp\left(-s^2/2\right). \tag{2.76}$$

De esta manera, se tiene que

$$\int_0^s ds' |\phi_0^{HO}(s')|^2 = \operatorname{erf}(s) - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp\left(-s^2\right), \tag{2.77}$$

donde erf(s) es la función error de s. Sin embargo $\int_0^r dr'|\psi_B(r')|^2$ es, salvo para $\lambda = 1$, una expresión muy complicada. Por lo tanto, ambas expresiones impiden el cálculo analítico de $s(r)$ y $r(s)$, respectivamente, al no poderse despejar ninguna de las dos variables en la ecuación (2.17). Por ello, para resolver la ecuación se opta por un procedimiento en el cual se utiliza una variable intermedia z que es

$$zr(r) = \int_0^r dr'|\psi_B(r')|^2, \tag{2.78}$$

$$zs(s) = \int_0^s ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2, \tag{2.79}$$

en función de r y s, respectivamente. A partir de ellas se obtienen las funciones inversas, $rz(z)$ y $sz(z)$, y de esta forma finalmente se obtiene la transformación buscada, $s(r)$, y su inversa, $r(s)$, como

$$s(r) = sz[zr(r)], \tag{2.80}$$

$$r(s) = rz[zs(s)]. \tag{2.81}$$

Por otro lado, hay que tener en cuenta que

$$zr(r) \to 1 \text{ conforme } r \to \infty, \tag{2.82}$$

$$zs(s) \to 1 \text{ conforme } s \to \infty, \tag{2.83}$$

por lo que a partir de unos determinados valores de r y s es conveniente calcular la LST a partir de la ecuación complementaria de (2.17)

$$\int_r^\infty dr'|\psi_B(r')|^2 = \int_s^\infty ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2, \tag{2.84}$$

donde de nuevo se tiene que

$$\int_s^\infty ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2 = \text{erfc}\,(s) + \frac{2}{\sqrt{\pi}}\exp\,(-s^2), \tag{2.85}$$

siendo erfc$\,(s)$ la función error complementaria de s. Sin embargo $\int_r^\infty dr'|\psi_B(r')|^2$ es, salvo para $\lambda = 1$, una expresión muy complicada. Así que de nuevo se realiza el mismo procedimiento definiendo ahora una variable z complementaria, zc, que es

$$zrc(r) = \int_r^\infty dr'|\psi_0(r')|^2, \tag{2.86}$$

$$zsc(s) = \int_s^\infty ds'|\phi_0^{HO}(s')|^2, \tag{2.87}$$

en función de r y s, respectivamente. A partir de ellas se obtienen las funciones inversas, $rzc(z)$ y $szc(z)$, y de esta forma finalmente se obtiene la LST buscada y su inversa como

$$s(r) = szc[zrc(r)], \tag{2.88}$$

$$r(s) = rzc[zsc(s)]. \tag{2.89}$$

La LST, $s(r)$, para ambos casos, PT y G, está representada en la figura 2.6, donde se puede observar cómo la diferencia entre los dos casos, no resonante y resonante, se refleja en la curvatura de la función $s(r)$ para el caso resonante a la distancia que corresponde a la barrera, $r_M = 2{,}04$.

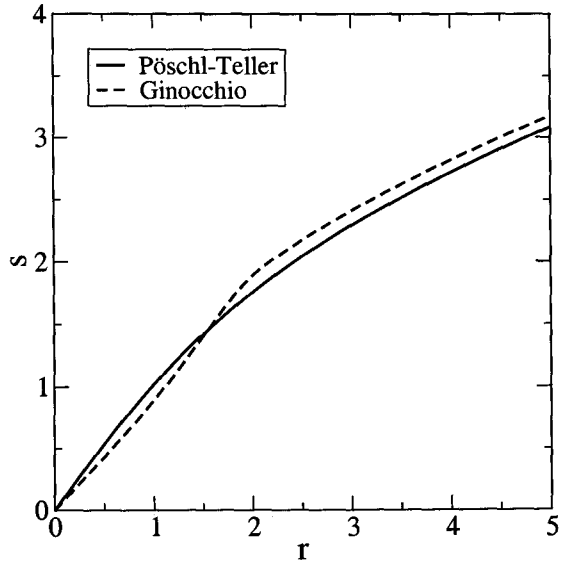


Figura 2.6: *Transformaciones locales de escala $s(r)$ para las funciones de onda del estado fundamental de PT y G.*

Una vez obtenida la LST, para generar la base THO sólo hay que aplicar esta a la base HO tal como se explica en el apartado 2.1.1 y se obtiene según la ecuación (2.19), donde N_n es la constante de normalización que viene dada por la ecuación (2.11). En la figura 2.7 se han representado las primeras cinco funciones de onda de la base THO para ambos casos, PT y G. Se puede ver cómo la función THO n-ésima tiene n nodos y que conforme aumenta n se extiende cada vez más. En cualquier caso, se observa que siempre una base THO finita describe mejor la zona de r en las proximidades del pozo.

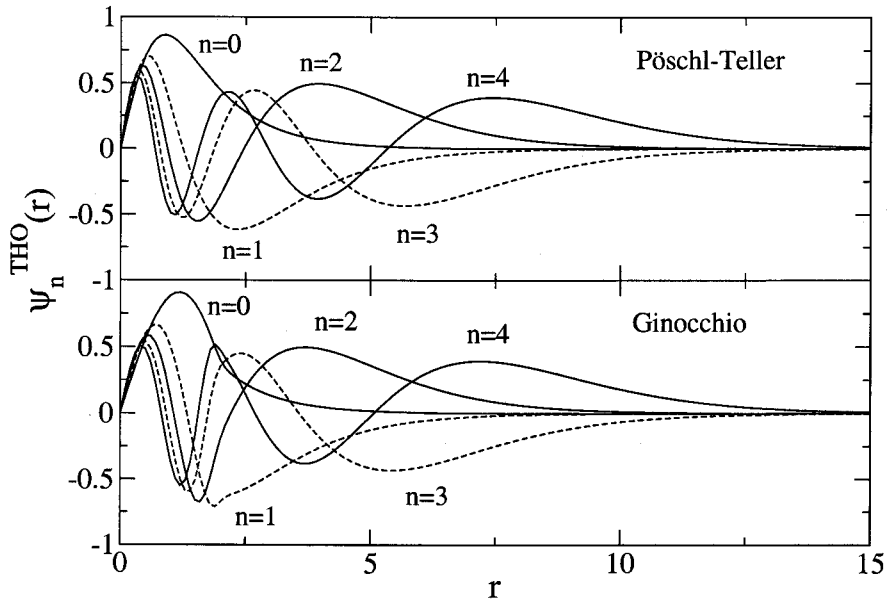


Figura 2.7: *Primeras cinco funciones de onda de las bases THO para PT y G.*

En la figura 2.8 se presentan las distribuciones de momento, $|\psi_n^{THO}(k)|^2$, de los primeros cuatro estados excitados de la base THO, para los casos PT y G. $\psi_n^{THO}(k)$ se define como

$$\psi_n^{THO}(k) \equiv \langle n|k\rangle = \int_0^\infty dr\ \psi_n^{THO}(r)\psi_k(r), \tag{2.90}$$

donde $\psi_k(r)$ es la función de onda del continuo para el momento k dada por la ecuaciones (2.54) y (2.59) con la normalización (2.61). Se observa que en el caso no resonante, PT, conforme aumenta n los estados describen mejor la zona de k pequeña y al mismo tiempo alcanzan una región de k mayor. Por otra parte, en el caso resonante, G, aparte de las mismas características del caso PT se observa cómo hay ciertas zonas de k mejor descritas por algunos estados THO. En particular se observa este efecto para la zona en torno a $k = 2$, que es aproximadamente el valor del momento de la primera resonancia del potencial G.

2.3.2. Diagonalización del hamiltoniano

Una vez obtenida la base THO, el paso siguiente es diagonalizar el hamiltoniano,

$$\widehat{h} = -\frac{d^2}{dr^2} + v(r), \tag{2.91}$$

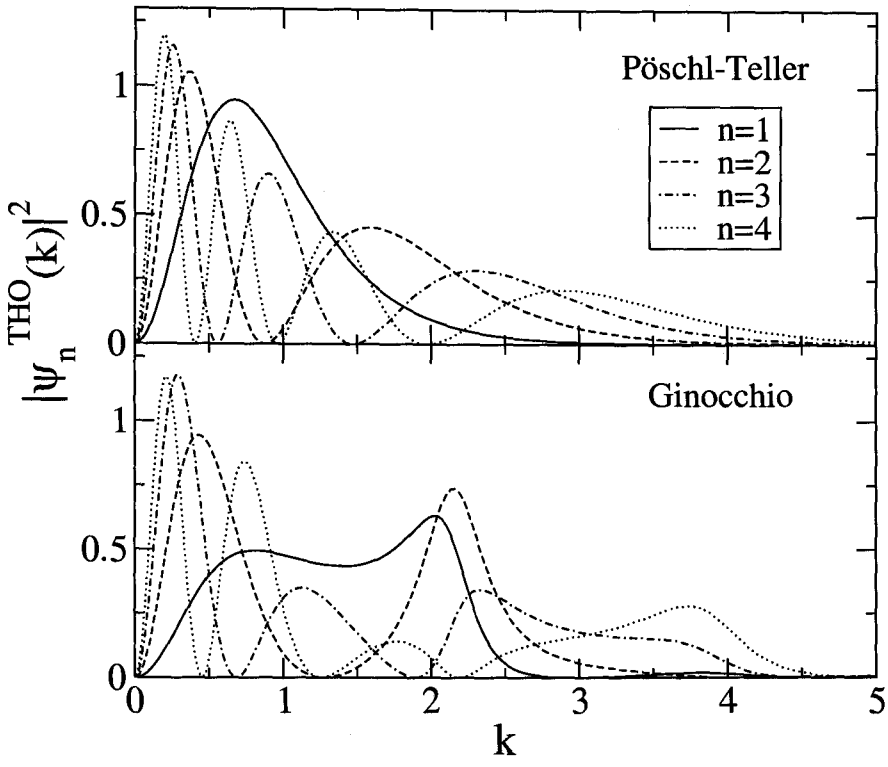


Figura 2.8: *Distribución de momentos de los primeros cuatro estados excitados de las bases THO para PT y G.*

en una base THO finita con N estados excitados. Para ello hay que calcular los elementos de matriz del hamiltoniano en la base THO.

Por comodidad, se va a utilizar la notación bra-ket tal que para un operador $\widehat{O}$ se tiene que

$$\langle n|\widehat{O}|m\rangle = \int_0^\infty dr\ \psi_n^{THO}(r)\widehat{O}\psi_m^{THO}(r). \tag{2.92}$$

Por otro lado, si se tiene en cuenta que para para dos funciones arbitrarias de r, $f(r)$ y $g(r)$, se cumple

$$2\langle 0|f(r)(\widehat{h}-e_B)g(r)|0\rangle = \langle 0|\left[f(r),\left[(\widehat{h}-e_B),g(r)\right]\right]|0\rangle \tag{2.93}$$

$$2\frac{df(r)}{dr}\frac{dg(r)}{dr} = \left[f(r),\left[(\widehat{h}-e_B),g(r)\right]\right], \tag{2.94}$$

se puede obtener una expresión compacta para los elementos de matriz del ha-

miltoniano menos la energía del estado fundamental, $(\widehat{h} - e_B)$,

$$\begin{aligned}\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle &= N_n N_m \langle 0|\frac{dL_n^{1/2}(s(r)^2)}{dr}\frac{dL_m^{1/2}(s(r)^2)}{dr}|0\rangle \\ &= N_n N_m \int_0^\infty dr|\psi_B(r)|^2 \frac{dL_n^{1/2}(s(r)^2)}{dr}\frac{dL_m^{1/2}(s(r)^2)}{dr}.\end{aligned} \tag{2.95}$$

Si se hace el cambio de variable $s = s(r)$ se tiene la integral que da el elemento de matriz expresada en la variable del HO, s,

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle = N_n N_m \int_0^\infty ds|\phi_0^{HO}(s)|^2 \frac{dL_n^{1/2}(s^2)}{ds}\frac{dL_m^{1/2}(s^2)}{ds}\left(\frac{ds(r)}{dr}\right)^2_{r=r(s)}, \tag{2.96}$$

donde la mejor forma de calcular la derivada de la transformación es a partir de la definición dada por la ecuación (2.16)

$$\frac{ds(r)}{dr} = \left(\frac{\psi_B(r)}{\phi_0^{HO}(s(r))}\right)^2. \tag{2.97}$$

Si ahora se hace otro cambio de variable, $t(s) = s^2$, para expresar la integral en la variable natural de la familia de polinomios que interviene en el problema, se tiene

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle = CN_n N_m \int_0^\infty dt\; t^{1/2}\exp(-t)\frac{dL_n^{1/2}(t)}{dt}\frac{dL_m^{1/2}(t)}{dt}\left(\frac{dt(r)}{dr}\right)^2_{r=r(t)} \tag{2.98}$$

siendo la constante C definida por la ecuación (2.14) y donde

$$\frac{dt(r)}{dr} = 2\sqrt{t(r)}\frac{ds(r)}{dr}. \tag{2.99}$$

En esta expresión se puede observar cómo aparece la medida, $d\mu(t)$, con respecto a la cual la familia de polinomios $\left(L_n^{1/2}\right)_n$ es ortogonal. Esta viene dada por la ecuación (2.13) y se puede expresar como

$$d\mu(t) = dt\, w(t), \tag{2.100}$$

donde $w(t)$ es la función peso. De esta manera se puede aproximar la integral por cuadratura de Laguerre, que para un determinado orden M será

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle \approx N_n N_m \sum_{i=1}^{M} w_i \left(\frac{dL_n^{1/2}(t)}{dt}\right)_{t=t_i}\left(\frac{dL_m^{1/2}(t)}{dt}\right)_{t=t_i}\left(\frac{dt(r)}{dr}\right)^2_{r=r(t_i)} \tag{2.101}$$

donde los pesos w_i son

$$w_i = C\frac{(M+1/2)!}{M!(M+1/2)^2}\frac{t_i}{\left(L_{M-1}^{1/2}(t_i)\right)^2} \tag{2.102}$$

y $\{t_i, i = 1, \ldots, M\}$ son los puntos de cuadratura, es decir, los puntos en los cuales el polinomio generalizado de Laguerre con $\alpha = 1/2$ de orden M se anula. Esta aproximación es razonable mientras intervengan polinomios de un orden $(n+m)$ inferior a M.

Antes de continuar se va expresar el elemento de matriz del hamiltoniano como el producto de dos vectores para su utilización posterior en otro apartado. Así, a partir de la expresión (2.98) e integrando por partes se tiene

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle = -N_n N_m \int_0^\infty dt \frac{d}{dt}\left[w(t)\frac{dL_n^{1/2}(t)}{dt}\left(\frac{dt(r)}{dr}\right)^2_{r=r(t)}\right] L_m^{1/2}(t) \tag{2.103}$$

y utilizando de nuevo cuadraturas se llega

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle \approx -\vec{V}_n.\vec{a}_m = -\vec{a}_n.\vec{V}_m, \tag{2.104}$$

donde

$$a_n^i = N_n\sqrt{w_i}L_n^{1/2}(t_i) \tag{2.105}$$

$$V_n^i = N_n\sqrt{w_i}\frac{1}{w(t_i)}\frac{d}{dt}\left[w(t)\frac{dL_n^{1/2}(t)}{dt}\left(\frac{dt(r)}{dr}\right)^2\right]_{t=t_i}. \tag{2.106}$$

Finalmente si se calculan los elementos de matriz del hamiltoniano a partir de la expresión (2.101),

$$\langle n|\widehat{h}|m\rangle = \langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle + e_B\delta_{nm}, \tag{2.107}$$

y se diagonaliza la matriz obtenida para una base THO finita con $N+1$ estados, se obtienen $N+1$ autovalores y sus correspondientes autovectores con $n = 0, \ldots, N$. Para el estado $n = 0$ se recupera el estado fundamental del sistema y los demás N estados representan al continuo de energía ya que en el caso considerado no hay más estados ligados. En la figura 2.9 se han representado los niveles de energía obtenidos de la diagonalización de ambos hamiltonianos, PT y G, conforme la dimensión de la base aumenta hasta $N = 15$. El orden de cuadratura utilizado es $M = 40$.

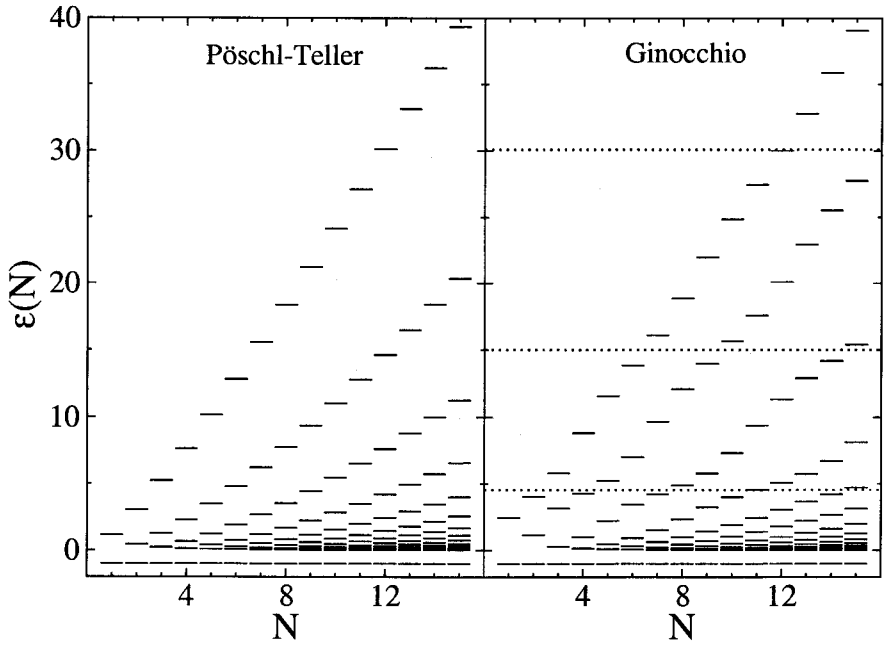


Figura 2.9: *Niveles de energía en las bases THO para los hamiltonianos PT y G como una función del número de estados incluidos en la base THO. Las energías conocidas de las primeras tres resonancias en el caso G se muestran por líneas de puntos.*

En ambos casos, la estructura de los niveles de energía es muy similar. La densidad de estados es mayor cerca del umbral de ruptura, que se encuentra en $\varepsilon = 0$, y conforme aumenta la dimensión de la base hay más estados empaquetados en la zona de ruptura y aparecen estados con energías cada vez más altas. Sin embargo, una inspección más detallada de los dos paneles de la figura 2.9 indica que mientras la densidad de niveles decrece de forma continua conforme la energía aumenta para el caso PT, en el caso G los niveles tienen una ligera tendencia a agruparse en torno a las energías de las resonancias:

- $\varepsilon_1^r = 4{,}55 \quad \Gamma_1 = 2{,}32$
- $\varepsilon_2^r = 14{,}99 \quad \Gamma_2 = 6{,}59$
- $\varepsilon_3^r = 30{,}08 \quad \Gamma_3 = 12{,}73.$

En la referencia [105] se muestra que, para el caso de resonancias estrechas, la diagonalización del hamiltoniano en una base discreta con una dimensión suficiente y, a la vez, no demasiado grande da algunos autoestados cuyas energías

son muy estables conforme la dimensión de la base aumenta, de manera que esta estabilidad se puede tomar como una señal de la resonancia. Pero, como puede verse en la figura 2.9, esto no se da para el caso de resonancias relativamente anchas como las que se consideran en este trabajo. Por ello, hay que avanzar más en ese sentido y desarrollar un procedimiento más general que permita describir resonancias.

2.3.3. Descripción de la resonancia

El primer paso es preguntarse si la resonancia puede ser descrita por algún autoestado del hamiltoniano en una base THO finita, pese a que no se observen autovalores muy estables conforme se aumenta la dimensión de la base. Para ilustrar la respuesta se muestran las figuras 2.10 y 2.11. En la primera se han representado las funciones de onda de los dos autoestados del hamiltoniano con energía más próxima a la primera resonancia en una base THO con $N = 15$ para el caso G. Se puede ver cómo ninguna de ellas presenta el carácter resonante. Para una resonancia se espera una probabilidad de presencia grande a distancias pequeñas reflejada en una amplitud grande de la función de onda dentro del pozo. En la figura 2.10, mediante una inspección visual, queda claro que éste no es el caso. Esta idea queda refrendada si se calculan las probabilidades de presencia dentro del pozo que son, $P[\varepsilon = 3{,}12] = 0{,}15$ y $P[\varepsilon = 4{,}71] = 0{,}56$. En la figura 2.11 se han representado las distribuciones de momentos de los mismos autoestados de hamiltoniano en una base THO con $N = 15$, comparada con la distribución de momentos esperada para una resonancia, que es una distribución lorentziana en energía dada por

$$\rho_l(k)dk = \frac{k}{\pi}\frac{\Gamma}{(k^2 - \varepsilon^r)^2 + (\Gamma/2)^2}dk. \tag{2.108}$$

En esta figura se puede ver cómo ninguno de estos autoestados representa la forma esperada para la resonancia aunque ambos están muy cerca en energía.

De esta manera se puede concluir que, en general, en una base discreta el carácter resonante está distribuido entre varios estados con energías en las proximidades de la energía de la resonancia.

El segundo paso es preguntarse si la resonancia, pese a no ser un autoestado del hamiltoniano, puede ser representada en una base THO finita. Para ello se

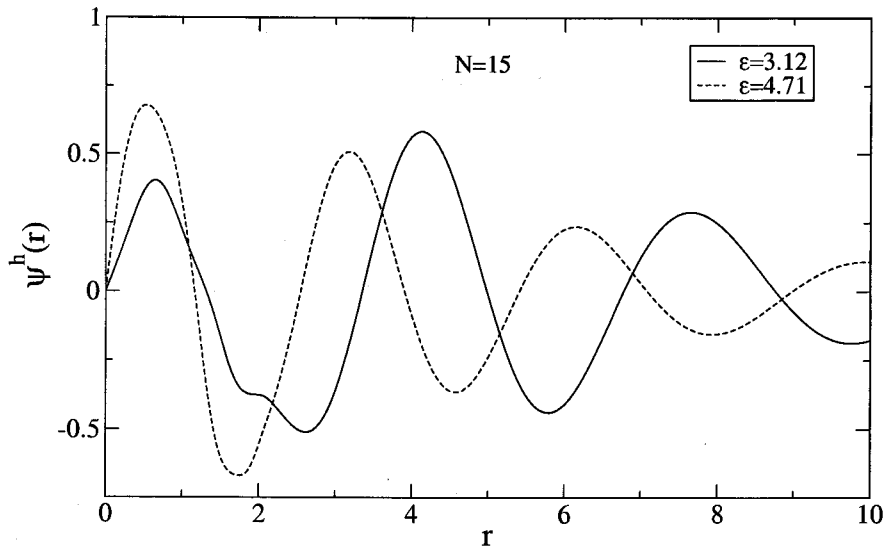


Figura 2.10: *Funciones de onda de los dos autoestados del hamiltoniano con energía próxima a la primera resonancia,* $\varepsilon_1^r = 4{,}55$*, en una base THO con* $N = 15$ *en el caso G.*

considera la función $\rho_N^{THO}(k)$ que se define como la suma de las distribuciones de momentos de los estados excitados incluidos en la base THO,

$$\rho_N^{THO}(k) = \sum_{n=1}^{N} |\psi_n^{THO}(k)|^2. \tag{2.109}$$

Esta es una medida de la completitud de la base THO finita en el espacio de momentos, ya que $\varepsilon = k^2$. Si se tomase la base completa, $\rho_{N\to\infty}^{THO}(k)$ sería infinita para todos los valores de k. Pero para una base finita, el valor de $\rho_N^{THO}(k)$ da cómo de apropiada es la base para describir cada rango de energía. Se puede ver en la figura 2.12, donde se ha representado $\rho_N^{THO}(k)$ para una base THO finita con $N = 15$, que para el caso no resonante la función $\rho_N^{THO}(k)$ disminuye de una forma monótona conforme k aumenta mientras que en el caso resonante aparecen tres máximos relativos que se corresponden exactamente con las tres primeras resonancias, tanto en posición como en anchura, como muestran las formas lorentzianas esperadas.

De esta forma se puede concluir que un estado resonante debería describirse bien dentro del espacio de Hilbert generado por una base THO finita, siempre que esta describa un rango de energía que englobe la energía de la resonancia.

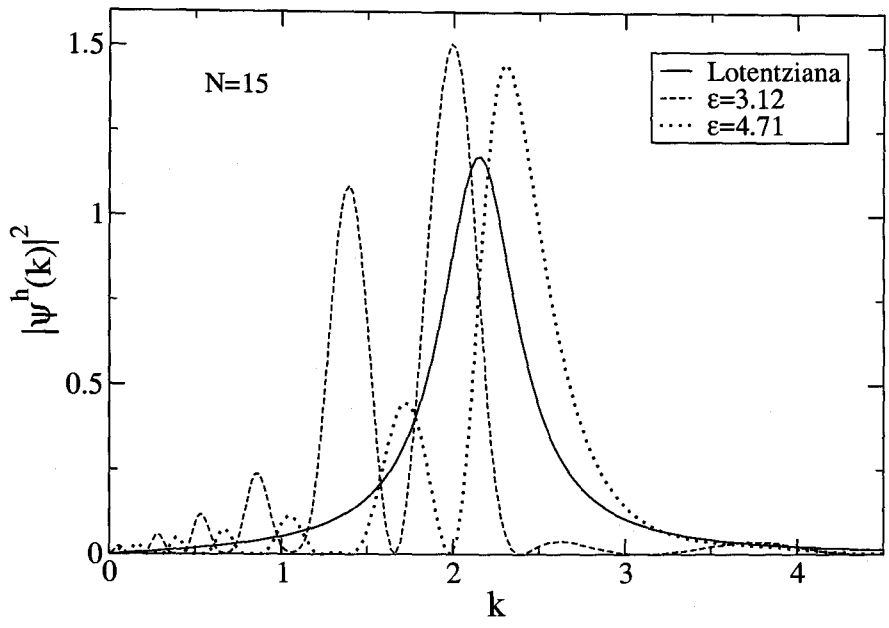


Figura 2.11: *Distribución de momentos de los dos autoestados del hamiltoniano con energía próxima a la primera resonancia en una base THO con $N = 15$ en el caso G, comparada con la distribución de momentos esperada para una resonancia (forma lorentziana).*

Así que el siguiente paso es obtener un método que permita discernir los estados resonantes en una base THO finita. Para ello, hay que tener en cuenta por un lado las características de la base utilizada y por otro las de la resonancia. De este modo, teniendo en cuenta que una base THO truncada describe siempre mejor las distancias del rango del potencial y que una resonancia es un estado localizado fundamentalmente dentro del pozo de potencial, se tiene que un estado resonante no debería estar fuertemente conectado a los estados que quedan fuera del subespacio THO. Por ello, si se define un operador que mida el acoplamiento entre los estados que están dentro y los que quedan fuera del subespacio THO, los autoestados de ese operador con autovalores pequeños y energías relativamente altas serán los relevantes para esta búsqueda. Con este objetivo se construye el operador $\widehat{\Delta}_N^2$, que se define

$$\widehat{\Delta}_N^2 = (\widehat{h} - e_B)^2 - \sum_{p=0}^{N} (\widehat{h} - e_B)|p\rangle\langle p|(\widehat{h} - e_B), \tag{2.110}$$

donde la base de estados $\{|p\rangle, p = 0, \ldots, N\}$ es la base THO con N estados

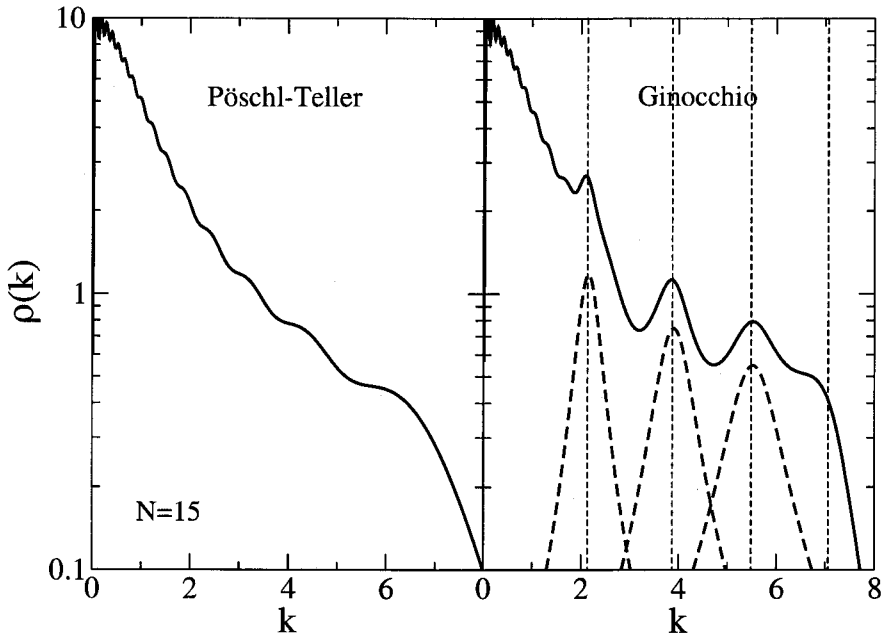


Figura 2.12: *Distribución de momentos $\rho_N^{THO}(k)$ para los potenciales PT y G en una base THO $N = 15$. La distribución de momentos $\rho_l(k)$ esperada para las tres primeras resonancias se muestra con línea discontinua. Con líneas verticales discontinuas se indica la posición de las resonancias.*

excitados, y se procede a su diagonalización en una base THO finita con N estados excitados como en el caso del hamiltoniano.

Para obtener los elementos de matriz de $\widehat{\Delta}_N^2$ en la base THO, en primer lugar, se necesitan conocer los elementos de matriz de $(\widehat{h} - e_B)^2$. Para ello, partiendo de la expresión de los elementos de matriz de $(\widehat{h} - e_B)$ dada por la ecuación (2.104),

se tiene

$$\begin{aligned}\langle n|(\widehat{h}-e_B)^2|m\rangle &= \sum_{p=0}^{\infty}\langle n|(\widehat{h}-e_B)|p\rangle\langle p|(\widehat{h}-e_B)|m\rangle \\ &= \sum_{p=0}^{\infty}\left(\vec{V}_n\cdot\vec{a}_p\right)\left(\vec{a}_p\cdot\vec{V}_m\right) \\ &= \sum_{p=1}^{\infty}\sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}V_n^i a_p^i a_p^j V_m^j \\ &= \sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{M}V_n^i\delta_{ij}V_m^j \\ &= \vec{V}_n\cdot\vec{V}_m.\end{aligned} \tag{2.111}$$

Una vez conocidos los elementos de matriz de $(\widehat{h}-e_B)$ y $(\widehat{h}-e_B)^2$, los de $\widehat{\Delta}_N^2$ resultan

$$\langle n|\widehat{\Delta}_N^2|m\rangle = \vec{V}_n\cdot\vec{V}_m - \sum_{p=0}^{N}(\vec{V}_n\cdot\vec{a}_p)(\vec{a}_p\cdot\vec{V}_m). \tag{2.112}$$

En la figura 2.13 se ha representado, para los casos PT y G, el valor esperado del hamiltoniano en los autoestados de $\widehat{\Delta}_N^2$, como una función de la dimensión de la base, N. Se han unido por líneas los valores correspondientes a los autovalores más bajos de $\widehat{\Delta}_N^2$ para cada valor de N, después los siguientes y así sucesivamente. No obstante conviene tener en cuenta que a lo largo de cada una de estas líneas $\widehat{\Delta}_N^2$ disminuye conforme aumenta N, ya que conforme aumenta la base hay estados cada vez mejor descritos. En la figura 2.13 se puede ver cómo en el caso no resonante los valores de la energía disminuyen monótonamente conforme N aumenta. Sin embargo en el caso resonante, la línea general de orientación no es siempre la misma. Hay algunos casos en los que un aumento en N, y por lo tanto, una disminución en $\widehat{\Delta}_N^2$, es acompañado por un aumento en el valor esperado de la energía. En la figura 2.13 se han marcado con símbolos los estados que se han identificado como resonancias porque tienen una probabilidad grande de estar dentro del potencial. Se puede ver así cómo existe una clara correspondencia entre las tres primeras resonancias y los autoestados de $\widehat{\Delta}_N^2$ que tienen un valor esperado de la energía anormalmente grande. También, debería notarse que el valor esperado de la energía es consistente con el promedio conocido de la energía de la resonancia. Así se concluye que las resonancias son autoestados de

$\widehat{\Delta}^2_N$ con energía grande que se desvían de la tendencia decreciente conforme N aumenta. Hasta el tamaño de base considerado en este trabajo cabe esperar una buena descripción para la primera resonancia, no obstante, la segunda y tercera resonancias también aparecen en la figura 2.13.

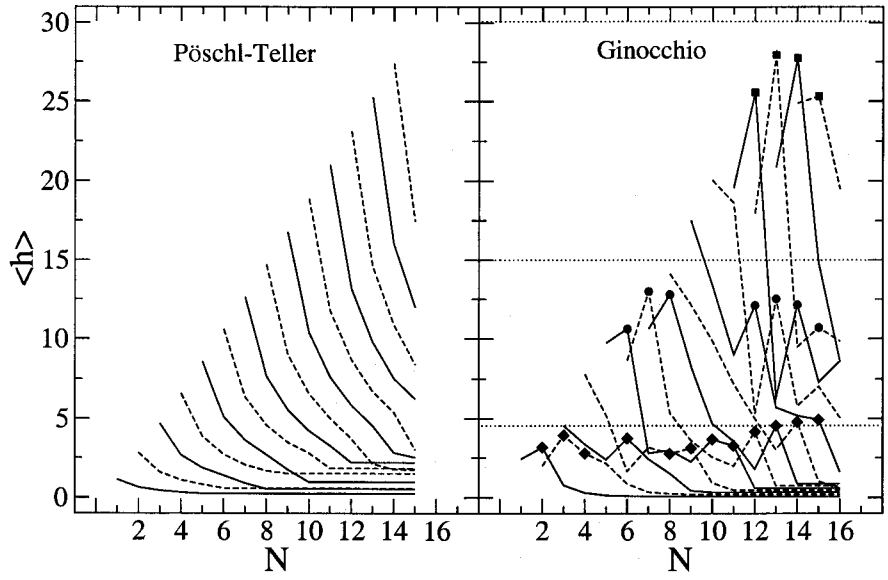


Figura 2.13: *Valor esperado de la energía para los autoestados de* $\widehat{\Delta}^2_N$ *en una base THO como una función de la dimensión de la base para los casos PT y G. Las resonancias están marcadas por símbolos especiales. Las energías conocidas de las tres primeras resonancias en el caso G se muestran con líneas de puntos.*

Para mostrar la robustez del método conforme aumenta la dimensión de la base THO, se han representado en la figura 2.14 las funciones de onda identificadas como resonancias conforme el tamaño de la base aumenta para las tres resonancias que aparecen. Para la primera se puede ver cómo la forma de las funciones de onda para los distintos valores de N prácticamente no se modifica en el interior del pozo de potencial. Para la segunda y tercera, las funciones de onda son relativamente estables dentro del pozo aunque cambian más que en el caso de la primera lo cual se debe a que el tamaño de la base, que cubre bien la región de energía de la primera resonancia, cubre escasamente las regiones de la segunda y tercera.

También se puede comparar la resonancia obtenida a partir de los autoestados de $\widehat{\Delta}^2_N$ en la base THO con el continuo verdadero. En primer lugar se ha com-

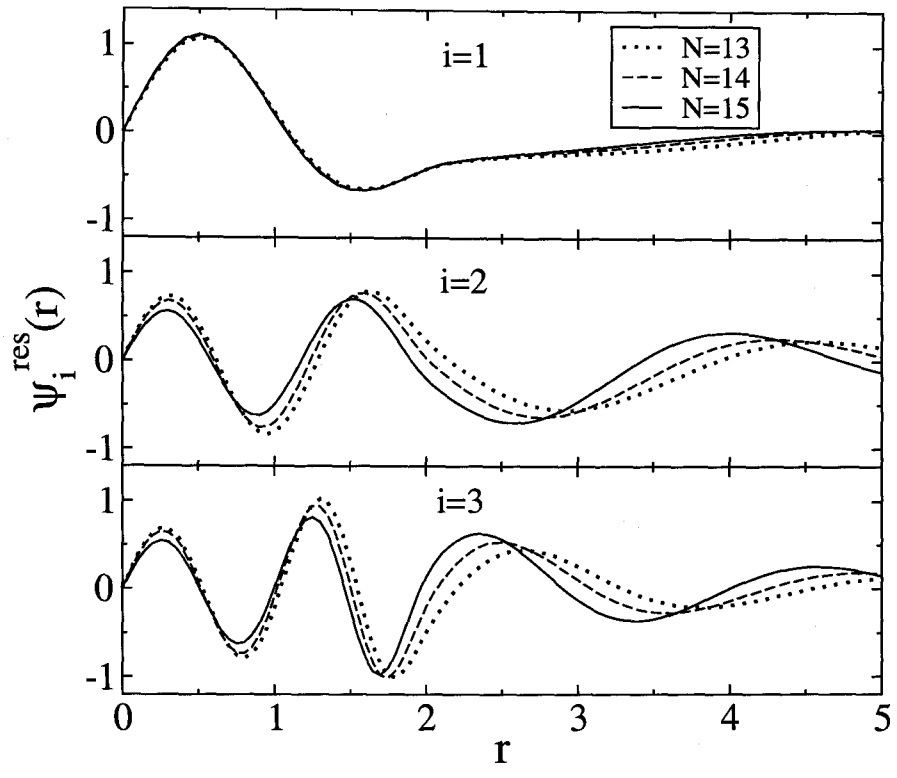


Figura 2.14: *Para el caso G, resonancias THO para diferentes valores del tamaño de la base: $N = 13, 14$ y 15. El panel superior es para la primera, el intermedio para la segunda y el inferior para la tercera.*

parado, para la primera resonancia, la función de onda de la resonancia THO de $N = 15$ con la función de onda del continuo real a la energía de la resonancia. Se puede ver en la figura 2.15 que las dos funciones presentan la misma forma dentro del rango del potencial. Fuera de él, la función de onda THO se anula mientras que la del continuo real oscila. Es destacable que aunque las dos funciones muestran valores similares dentro del pozo tienen diferente criterio de normalización y, por ello, no son comparables directamente. Mientras la función de onda THO está normalizada a la unidad, la función de onda del continuo satisface la ecuación (2.61). Sin embargo, cualquier paquete que se construya con las funciones de onda del continuo a energías próximas a la de la resonancia es de cuadrado integrable y por lo tanto se puede comparar directamente con la resonancia THO. De esta manera también se ha comparado en la figura 2.15 la resonancia THO con un promedio de las funciones de onda del continuo, siguiendo el método *bins*

Av descrito en el apartado 1.5. El *bin* se toma en el rango determinado por la resonancia, es decir, por su energía y su anchura. Puede verse cómo la función de onda del *bin* tiene una amplitud menor de estar en el interior del pozo que la resonancia THO para $N = 15$, lo cual se refrenda si se comparan las probabilidades de presencia de estar dentro del pozo que son, $P_{THO} = 0{,}92$ y $P_{bin} = 0{,}55$.

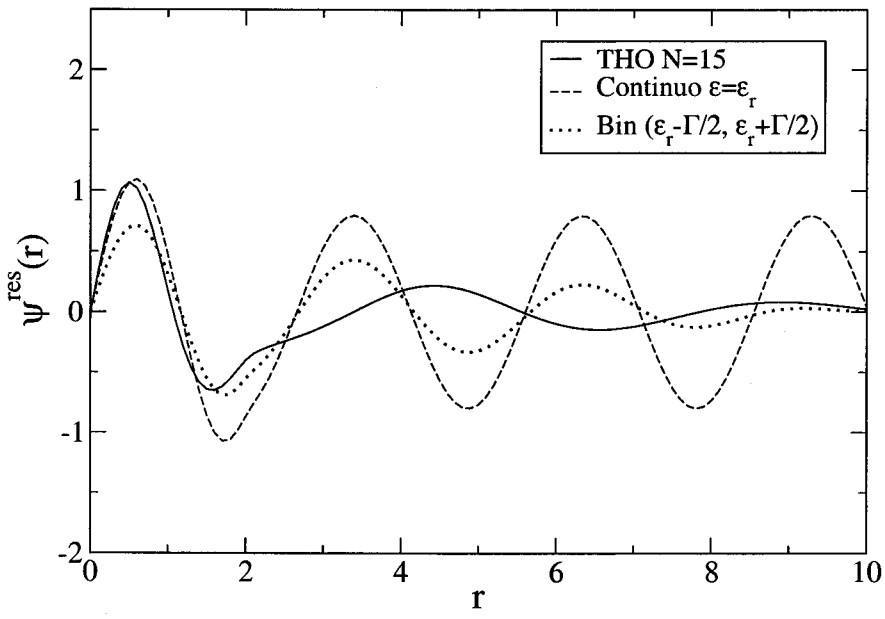


Figura 2.15: *Para el caso G, resonancia THO en la base* $N = 15$ *comparada con la función de onda del continuo real y la función de onda del* bin.

Por último, en la figura 2.16 se ha comparado la forma lorentziana esperada para la primera resonancia con la distribución de momentos de la resonancia THO en la base con $N = 15$. Se puede ver cómo ahora esta distribución de momentos reproduce la forma esperada para la resonancia, obteniéndose bien tanto la posición como la anchura de la resonancia.

2.3.4. Acoplamiento del estado fundamental con el continuo

Una vez que se ha conseguido representar la resonancia mediante un estado que presenta sus características dentro del subespacio generado por una base finita THO, se puede estudiar el acoplamiento del estado fundamental con el continuo,

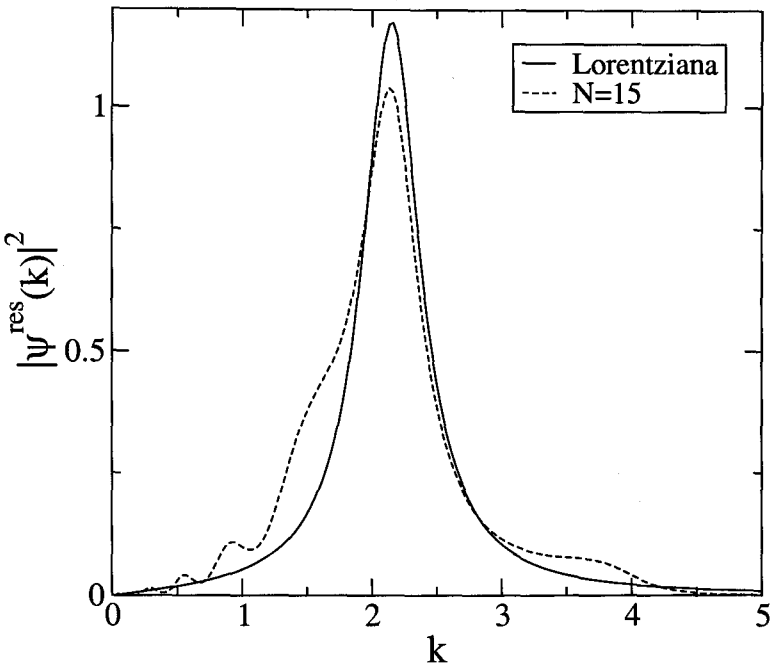


Figura 2.16: *Para el caso G, distribución de momentos para la primera resonancia THO con $N = 15$ comparada con la distribución esperada (forma lorentziana).*

determinando así el papel del continuo resonante respecto al no resonante y cómo de buena es la base THO para describir ambas partes. Para ello se va a considerar la función de excitación asociada al operador r .

Las amplitudes de acoplamiento del estado fundamental con el continuo se evalúan en la base THO de la forma

$$A(k) = \langle 0|r|k\rangle \approx \sum_{n=1}^{N} \langle 0|r|n\rangle\langle n|k\rangle. \tag{2.113}$$

La función de excitación del operador r viene dada entonces por

$$S(k) = |A(k)|^2. \tag{2.114}$$

En la figura 2.17 se ha dibujado la función de excitación exacta

$$S(k) = |\langle 0|r|k\rangle|^2 \tag{2.115}$$

y la función de excitación obtenida para una base THO con $N = 15$. Ambos resultados son básicamente el mismo tanto para PT como para G, por lo que en

este cálculo una base THO con $N = 15$ reproduce el efecto del continuo tanto para el caso no resonante como para el resonante.

Por otro lado, en la figura 2.17, se puede ver claramente cómo en el caso no resonante, la función de excitación es una función suave del momento. Sin embargo, en el caso resonante aparece, en el rango de valores del momento que corresponden a la primera resonancia, una estructura que está claramente asociada a la resonancia. También se puede evaluar para el caso G la contribución de la primera resonancia THO a la excitación total del continuo. La amplitud que corresponde a la resonancia i viene dada por

$$A^{R,i}(k) = \langle 0|r|\widehat{\Delta}^2_N; i\rangle\langle\widehat{\Delta}^2_N; i|k\rangle, \tag{2.116}$$

donde $|\widehat{\Delta}^2_N; i\rangle$ es el autoestado de $\widehat{\Delta}^2_N$ en notación bra-ket que se identifica con la resonancia i del potencial G. Si se evalúa la contribución del estado THO que corresponde a la primera resonancia, se puede observar en la figura 2.17 que el pico que presenta la función de excitación en el caso G alrededor de $k = 2$ es claramente reproducido por este único estado, mientras que el pico por debajo de $k = 1$ nada tiene que ver con la resonancia. Este hecho fue puesto de manifiesto por primera vez en la referencia [138], donde se estudiaron las distribuciones de intensidad en el continuo de operadores r^λ. En este trabajo se estableció la diferencia cualitativa entre la concentración de intensidad debida a estados resonantes y la que aparece asociada con la estructura de baja energía cuando se estudian núcleos ricos en neutrones próximos a la línea de evaporación.

Las contribuciones de la segunda y tercera resonancias también se pueden evaluar y pueden interferir entre ellas y también con el continuo no resonante.

En estos subapartados se ha mostrado cómo un método particular, el método THO, englobado dentro del método OP para la discretización del continuo proporciona una base discreta capaz de describir la parte resonante del continuo de energía. Se ha desarrollado un método que permite obtener un estado normalizable que representa a la resonancia. Este trabajo se recoge en el artículo [139]. A continuación se va a realizar el mismo proceso pero utilizando otro método particular del método OP, el método TOP, para investigar si el método presentando para obtener resonancias es general.

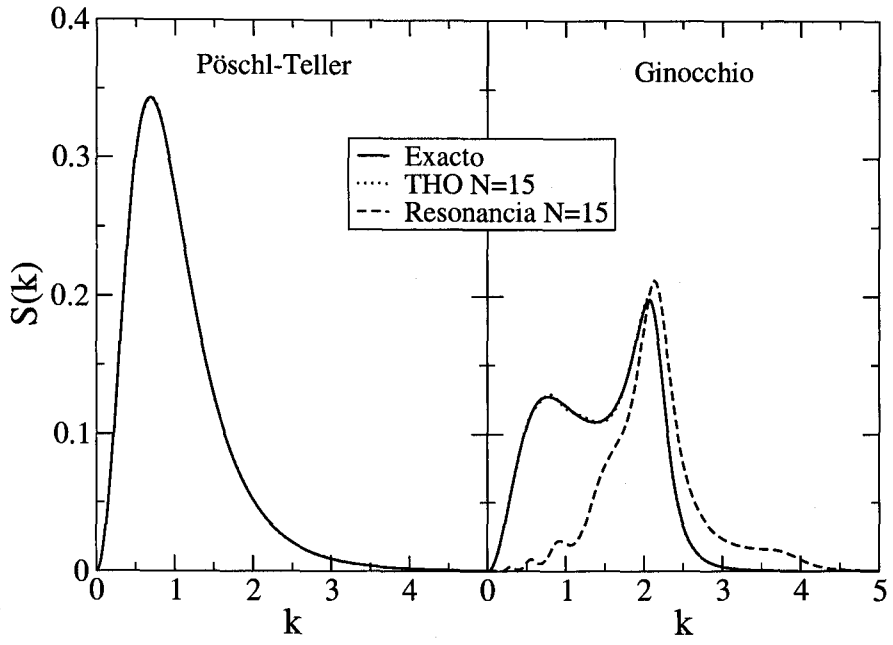


Figura 2.17: *Función de excitación $S(k)$ para el operador r como una función del momento para los potenciales PT y G. Se presentan para ambos casos, el valor exacto y el obtenido para una base THO con $N = 15$ (que son casi indistinguibles). También se muestra la contribución de la primera resonancia THO en el caso G con una línea discontinua.*

2.3.5. Comparación con el método TOP

Se puede realizar un procedimiento análogo al método THO para el método TOP, primero aplicando el método y después realizando el mismo proceso de búsqueda de la resonancia establecido en el subapartado anterior.

Para aplicar el método TOP el primer paso es generar la familia de polinomios ortogonales en la variable $s(r) = r^2$. Para ello, sólo se necesita conocer la función de onda del estado fundamental que en el caso considerado, el potencial de Ginocchio, se conoce analíticamente. Conocida esta queda definida la medida, dada por (2.20), respecto a la cual la familia de polinomios es ortogonal y donde se tiene de nuevo que $\psi_B(r)$ es el estado fundamental ligado del sistema.

Así, si los polinomios $(P_n^{TOP})_n$ se desarrollan como (2.23) y se elige la familia de polinomios mónicos, $C_{nn} = 1$, entonces se impone para cada polinomio de orden n la condición de ortogonalidad respecto a los polinomios de orden m inferior, $m = 0, \ldots, n-1$, planteándose así un sistema de n ecuaciones con n

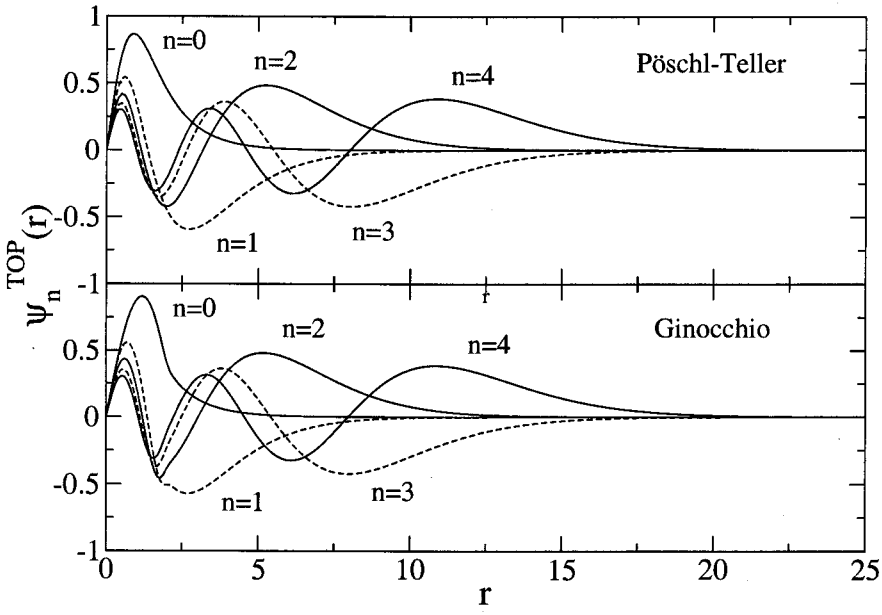


Figura 2.18: *Primeras cinco funciones de onda de las bases TOP para PT y G.*

incógnitas, $\{C_{np}, p = 0, \ldots, n-1\}$, dado por (2.24). La obtención de los polinomios a partir de estos sistemas de ecuaciones es por recurrencia ya que para obtener los coeficientes $\{C_{np}, p = 0, \ldots, n-1\}$ del polinomio de orden n es necesario determinar antes los coeficientes de los polinomios de orden inferior $\{C_{ml}, l = 0, \ldots, m-1, m = 0, \ldots, n-1\}$.

Una vez generada la familia de polinomios TOP, el segundo paso es generar la base TOP según la ecuación (2.29), donde M_n es la constante de normalización dada por la ecuación (2.30). En la figura 2.18 se presentan las funciones de onda de los primeros cinco estados TOP para ambos potenciales, PT y G. Se puede ver cómo, al igual que en el caso THO, la función TOP n-ésima presenta n nodos y cómo conforme aumenta n se extiende cada vez más. De forma que de nuevo, una base TOP finita describirá siempre mejor las proximidades del potencial. Pero si se compara con la base THO, representada en la figura 2.7, para cada n fijo, la función TOP es más extensa que la obtenida para el método THO. Esto parece indicar que el método TOP describiría mejor los operadores de largo alcance y el THO los de corto alcance.

En la figura 2.19 se presentan las distribuciones de momento, $|\psi_n^{TOP}(k)|^2$, de los primeros cuatro estados excitados de la base TOP, para los casos PT y G.

$\psi_n^{TOP}(k)$ se define como

$$\psi_n^{TOP}(k) \equiv \langle n|k\rangle = \int_0^\infty dr\ \psi_n^{TOP}(r)\psi_k(r), \tag{2.117}$$

donde $\psi_k(r)$ es la función de onda del continuo para el momento k dada por la ecuaciones (2.54) y (2.59) con la normalización (2.61). Se observa cómo en el caso no resonante, PT, conforme aumenta n los estados describen mejor la zona de k pequeña y al mismo tiempo alcanzan una región de k ligeramente mayor. En el caso resonante, G, aparte de las mismas características del caso PT se observa cómo hay una zona, en torno a $k = 2$, mejor descrita por todos los estados representados. Este valor de k es aproximadamente el valor del momento de la primera resonancia del potencial G.

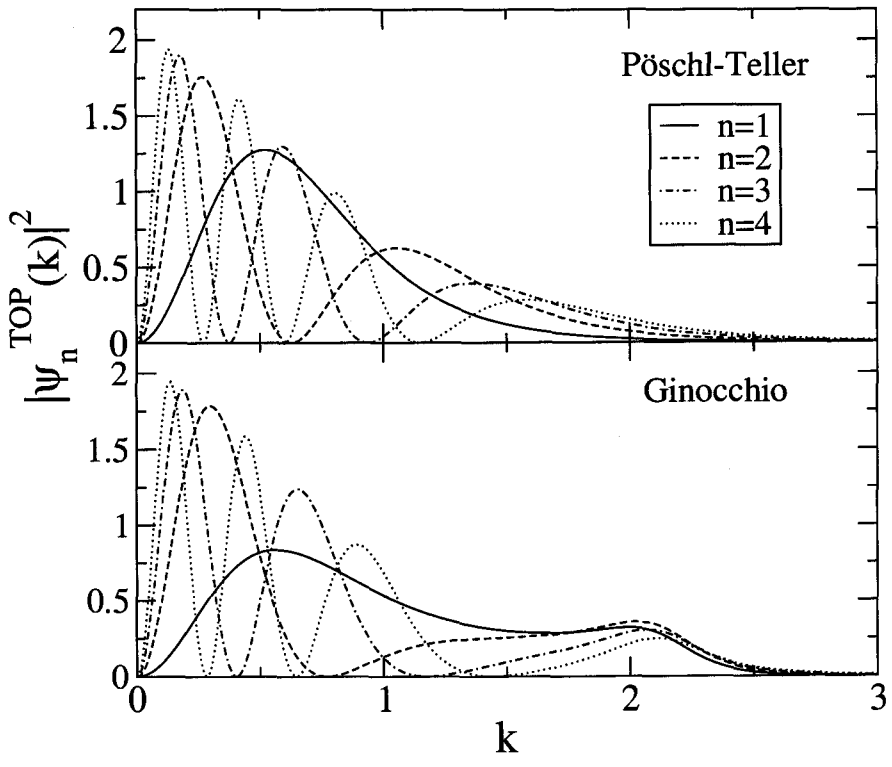


Figura 2.19: *Distribución de momentos de los primeros cuatro estados excitados de las bases TOP para PT y G.*

Una vez obtenida la base, el siguiente paso será diagonalizar el hamiltoniano, dado por la ecuación (2.91), en una base TOP finita con N estados excitados.

Para ello hay que calcular los elementos de matriz del hamiltoniano en la base TOP.

De nuevo, por comodidad, se va a utilizar la notación bra-ket tal que para un operador $\widehat{O}$ se tiene que

$$\langle n|\widehat{O}|m\rangle = \int_0^\infty dr\ \psi_n^{TOP}(r)\widehat{O}\psi_m^{TOP}(r). \tag{2.118}$$

De igual manera que en el caso THO, haciendo uso de las ecuaciones (2.93) y (2.94), se pueden expresar los elementos de matriz de $(\widehat{h} - e_B)$ en la forma compacta siguiente

$$\begin{aligned}\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle &= M_n M_m \langle 0|\frac{dP_n^{TOP}(r^2)}{dr}\frac{dP_m^{TOP}(r^2)}{dr}|0\rangle \\ &= M_n M_m \int_0^\infty dr|\psi_B(r)|^2 \frac{dP_n^{TOP}(r^2)}{dr}\frac{dP_m^{TOP}(r^2)}{dr}.\end{aligned} \tag{2.119}$$

Si se hace el cambio de variable $s(r) = r^2$ se obtiene

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle = M_n M_m \int_0^\infty d\mu(s)\frac{dP_n^{TOP}(s)}{ds}\frac{dP_m^{TOP}(s)}{ds}\left(\frac{ds(r)}{dr}\right)^2_{r=\sqrt{s}}, \tag{2.120}$$

donde

$$\frac{ds(r)}{dr} = 2r = 2\sqrt{s(r)}. \tag{2.121}$$

Si ahora se considera el desarrollo (2.23) de los polinomios, su derivada será

$$\frac{dP_n^{TOP}(s)}{ds} = \sum_{p=0}^{n} p\ C_{np}s^{p-1} \tag{2.122}$$

y por lo tanto queda

$$\begin{aligned}\langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle &= 4\sum_{p=0}^{n}\sum_{l=0}^{m} p\ l\ C_{np}C_{ml}\int_0^\infty d\mu(s)s^{p+l-1} \\ &= 4\sum_{p=0}^{n}\sum_{l=0}^{m} p\ l\ C_{np}C_{ml}\langle s^{p+l-1}\rangle.\end{aligned} \tag{2.123}$$

Así, los elementos de matriz de hamiltoniano se calculan a partir de esta ecuación (2.123),

$$\langle n|\widehat{h}|m\rangle = \langle n|(\widehat{h} - e_B)|m\rangle + e_B\delta_{nm}, \tag{2.124}$$

y diagonalizando la matriz correspondiente a una base TOP con $N+1$ estados, se obtienen $N+1$ autovalores con sus correspondientes autovectores con

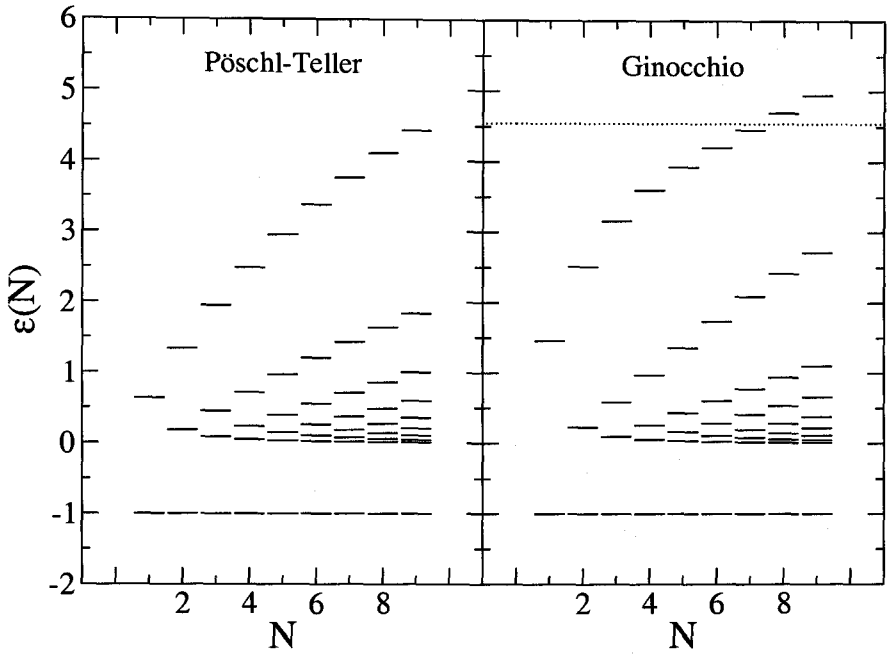


Figura 2.20: *Niveles de energía en las bases TOP para los hamiltonianos PT y G como una función del número de estados incluidos en la base TOP. La energía conocida de la primera resonancia en el caso G se muestra por una línea de puntos.*

$n = 0, \ldots, N$. De nuevo, para $n = 0$ se recupera el estado fundamental y los estados con $n > 0$ se toman como representativos del espectro continuo de energía. En la figura 2.20 se han representado los niveles de energía obtenidos en la diagonalización de ambos hamiltonianos, PT y G, conforme N aumenta hasta $N = 9$.

Al igual que en el caso THO, se observa cómo conforme aumenta N hay más estados empaquetados en la zona de ruptura mientras que aparecen estados a energías cada vez más altas. Por otro lado, se observa el mismo cambio de comportamiento que en el caso THO entre ambos espectros, no resonante y resonante, en torno al valor de la energía de la primera resonancia $\varepsilon_1^r = 4{,}55$, ya que en este caso es la única que se alcanza dentro del rango de energía barrido por los autovalores. En comparación con el caso THO, se tiene que para una misma dimensión de la base los autovalores de la base TOP alcanzan valores de energía más bajos. Esto está íntimamente relacionado con el hecho de que las funciones de onda en el espacio de coordenadas de la base TOP son más extensas, ya que las funciones de onda en el espacio de coordenadas y en el espacio de momentos son una la

transformada de Fourier de la otra.

Una vez diagonalizado el hamiltoniano en una base TOP finita y habiendo comprobado que los espectros de energía presentan las mismas características, se procede a comprobar que la base TOP también puede reproducir la resonancia. Para ello, se considera de nuevo la función $\rho_N^{TOP}(k)$, que se define en este caso como la suma de las distribuciones de momento de los estados excitados incluidos en la base TOP,

$$\rho_N^{TOP}(k) = \sum_{n=1}^{N} |\psi_n^{TOP}(k)|^2. \tag{2.125}$$

En la figura 2.21 se ha representado $\rho_N^{TOP}(k)$ para una base TOP finita con $N = 9$ para ambos casos, PT y G, con la idea de comprobar que la base TOP puede describir esta primera resonancia. Se puede ver cómo, de nuevo, mientras para el caso no resonante, PT, $\rho_N^{TOP}(k)$ disminuye de forma continua conforme k aumenta, en el caso resonante, G, aparece un máximo relativo que se corresponde con la primera resonancia en posición y anchura como muestra la forma lorentziana esperada para esta primera resonancia.

De manera que, desarrollando el método para la búsqueda de la resonancia establecido en el apartado 2.3.3, se procede a la diagonalización del operador $\widehat{\Delta}_N^2$ dado por la ecuación (2.110), donde en este caso se tomará la base TOP como base $\{|p\rangle, p = 0, \ldots, N\}$, con el objetivo de discernir entre continuo resonante y no resonante.

Para obtener los elementos de matriz de $\widehat{\Delta}_N^2$, de nuevo, en primer lugar se necesitan conocer los elementos de matriz de $(\widehat{h} - e_B)^2$, que tienen la forma

$$\langle n|(\widehat{h} - e_B)^2|m\rangle = \langle 0|P_n^{TOP}(r)(\widehat{h} - e_B)^2 P_m^{TOP}(r)|0\rangle. \tag{2.126}$$

Teniendo en cuenta que para una función $f(r)$ arbitraria

$$f(r)(\widehat{h} - e_B) = (\widehat{h} - e_B)f(r) - [(\widehat{h} - e_B), f(r)], \tag{2.127}$$

$$[(\widehat{h} - e_B), f(r)] = -\frac{d^2 f(r)}{dr^2} - 2\frac{df(r)}{dr}\frac{d}{dr}, \tag{2.128}$$

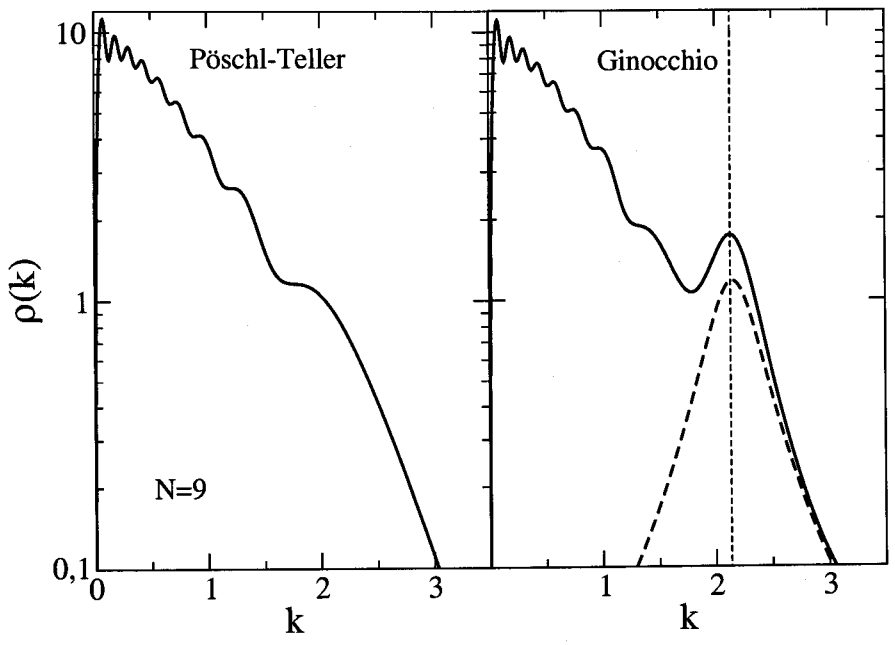


Figura 2.21: *Distribución de momentos $\rho_N^{TOP}(k)$ para los potenciales PT y G en una base TOP con $N = 9$. La distribución de momentos esperada para la primera resonancia $\rho_l(k)$ se muestra con una línea discontinua. Y con una línea vertical discontinua se indica la posición de la resonancia.*

se tiene

$$\begin{aligned}
\langle n|(\widehat{h}-e_B)^2|m\rangle &= \left(\langle 0|[(\widehat{h}-e_B),P_n^{TOP}]\right)\left([P_m^{TOP},(\widehat{h}-e_B)^2]|0\rangle\right) \\
&= \langle 0|\frac{d^2P_n^{TOP}(r)}{dr^2}\frac{d^2P_m^{TOP}(r)}{dr^2}|0\rangle \\
&\quad + 2\langle 0|\frac{d^2P_n^{TOP}(r)}{dr^2}\frac{dP_m^{TOP}(r)}{dr}\left(\frac{d}{dr}|0\rangle\right) \\
&\quad + 2\left(\langle 0|\frac{d}{dr}\right)\frac{dP_n^{TOP}(r)}{dr}\frac{d^2P_m^{TOP}(r)}{dr^2}|0\rangle \\
&\quad + 4\left(\langle 0|\frac{d}{dr}\right)\frac{dP_n^{TOP}(r)}{dr}\frac{dP_m^{TOP}(r)}{dr}\left(\frac{d}{dr}|0\rangle\right).
\end{aligned} \tag{2.129}$$

Así, teniendo en cuenta la forma explícita de los polinomios, se obtiene

$$\begin{aligned}
\langle n|(\widehat{h}-e_B)^2|m\rangle = \sum_{p=1}^{n}\sum_{l=1}^{m} 4\ p\ l\ C_{np}C_{ml}\ \big[&(2p-1)(2l-1)\langle r^{2(p+l-2)}\rangle \\
&+4\ (p+l-1)\langle\langle r^{2(p+l+3/2)}\rangle\rangle + 4\langle\langle\langle r^{2(p+l-1)}\rangle\rangle\rangle\big],
\end{aligned} \tag{2.130}$$

donde

$$\langle r^{2p} \rangle = \int_0^\infty dr \, (\psi_B(r))^2 \, r^{2p}, \tag{2.131}$$

$$\langle\langle r^{2p} \rangle\rangle = \int_0^\infty dr \, \psi_B(r) \frac{d\psi_B(r)}{dr} r^{2p}, \tag{2.132}$$

$$\langle\langle\langle r^{2p} \rangle\rangle\rangle = \int_0^\infty dr \left(\frac{d\psi_B(r)}{dr} \right)^2 r^{2p}. \tag{2.133}$$

De esta manera, una vez conocidos los elementos de matriz de $(\widehat{h}-e_B)$ y $(\widehat{h}-e_B)^2$, se calculan los elementos de matriz del operador $\widehat{\Delta}_N^2$ y se diagonaliza éste en una base TOP finita con $N+1$ estados.

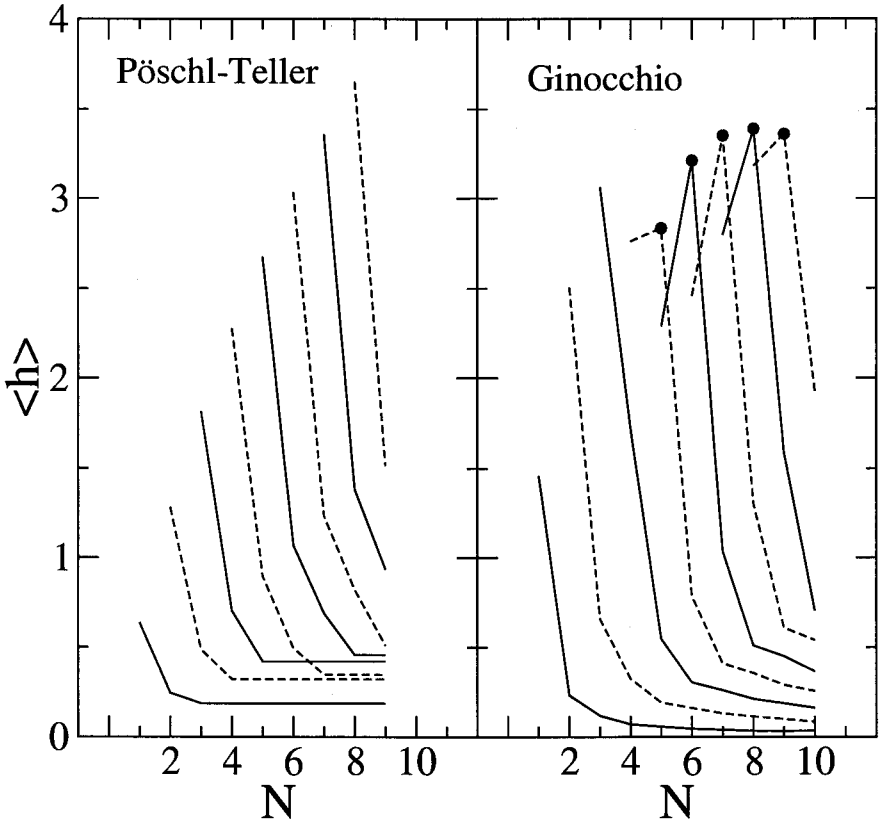


Figura 2.22: *Valor esperado de la energía para los autoestados de $\widehat{\Delta}_N^2$ en una base TOP como una función de la dimensión de la base para los casos PT y G. Las resonancias están marcadas por símbolos especiales.*

En la figura 2.22 se ha representado, para los casos PT y G, el valor esperado del hamiltoniano en los autoestados de $\widehat{\Delta}_N^2$ como una función de la dimensión

de la base, N. De igual manera que el caso THO, se han unido por líneas los valores correspondientes a los autovalores más bajos de $\widehat{\Delta}_N^2$ para cada valor de N, después los siguientes y así sucesivamente. Se puede ver de nuevo cómo en el caso no resonante los valores esperados de la energía disminuyen monótonamente conforme N aumenta mientras en el caso resonante la línea general de orientación no es siempre la misma. Hay algunos casos en los que un aumento en N es acompañado por un aumento en el valor esperado de la energía. En la figura 2.22 se han marcado con símbolos los estados que se han identificado como resonancias porque tienen una probabilidad grande de estar dentro del potencial. Se puede ver así cómo existe una clara correspondencia entre la primera resonancia y los autoestados de $\widehat{\Delta}_N^2$ que tienen un valor esperado de la energía anormalmente grande. Las demás resonancias no aparecen ya que hasta la base considerada, $N = 9$, los autovalores no describen las regiones de energía de ellas.

De nuevo, se puede mostrar la robustez del método conforme aumenta la dimensión de la base, representando en la figura 2.23 las funciones de onda identificadas con la primera resonancia conforme el tamaño de la base aumenta. Se puede ver cómo la forma de las funciones de onda prácticamente no se modifica, especialmente en el interior del pozo.

Finalmente, se puede comparar la resonancia TOP con la THO. Así, en la figura 2.24, se han representado las funciones de onda de la primera resonancia obtenidas por ambos métodos, THO y TOP, y se puede ver cómo ambas tienen la característica común de tener una probabilidad mayor de estar dentro del pozo de potencial y de tender a cero fuera de él.

De esta manera se puede concluir que el procedimiento propuesto para discernir las resonancias en una base discreta no es característico de un método particular del método OP, sino que es general.

En este último subapartado se ha mostrado cómo otro método particular, el método TOP, englobado en el método OP también proporciona una base discreta capaz de describir la parte resonante del continuo de energía. Se ha comprobado que el mismo procedimiento, desarrollado con el método THO, para obtener un estado normalizable que represente a la resonancia es aplicable con el método TOP. De manera que se puede concluir que el procedimiento establecido para discernir el continuo resonante del no resonante es general.

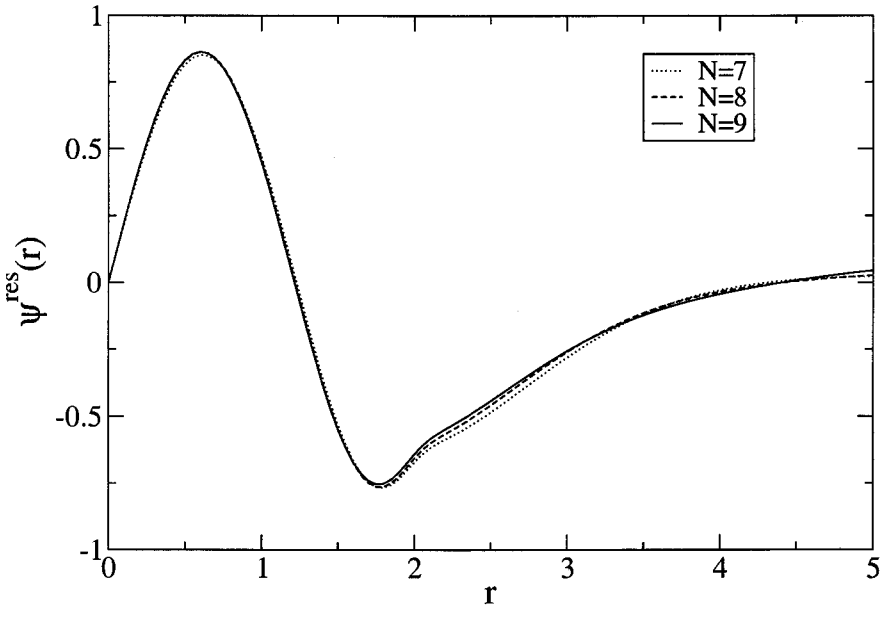


Figura 2.23: *Resonancia TOP para diferentes valores del tamaño de la base:* $N = 7, 8$ *y* 9.

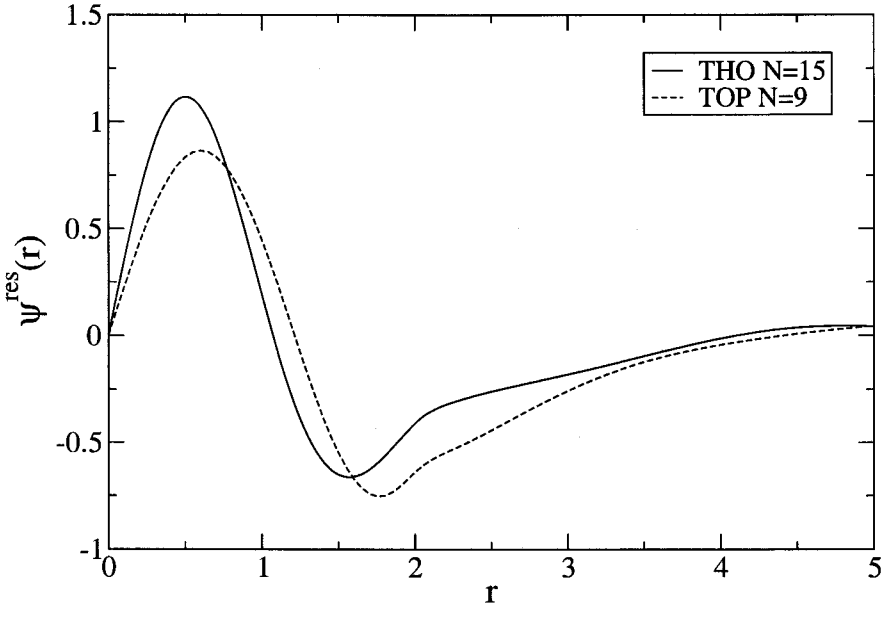


Figura 2.24: *Funciones de onda de la primera resonancia para los métodos THO y TOP.*

***

En este capítulo se ha introducido el método de discretización del continuo OP para un sistema de dos cuerpos con simetría esférica, desarrollándose dos casos particulares, los métodos THO y TOP. Estos métodos se han aplicado a un potencial resoluble analíticamente, el potencial de Ginocchio, que en función del valor de sus parámetros presenta resonancias, G, o no, PT. Utilizando la base generada con ambos métodos de discretización, se ha desarrollado un procedimiento que permite construir un estado normalizable que es representativo de la resonancia. Con lo cual se concluye que ambos métodos proporcionan una base discreta capaz de describir la parte resonante del continuo de energía.

Capítulo 3

Método THO para sistemas de tres cuerpos: aplicación al núcleo ^{6}He

En el capítulo anterior se ha presentado el método del oscilador armónico trasformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO) aplicado a un sistema de dos cuerpos en un potencial central. En este capítulo se va a proceder a la generalización del método THO para su aplicación a un sistema de tres cuerpos y se va a estudiar la convergencia en la base THO de diferentes observables de estructura como las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$.

Como se va a tratar un problema de tres cuerpos se va a trabajar en 6 dimensiones (6D), es decir, se necesitan 6 variables continuas aparte de los espines. Las coordenadas que se utilizan en 6D son las coordenadas de Jacobi $\{\vec{x}, \vec{y}\}$ y las coordenadas hiperesféricas $\{\rho, \alpha, \widehat{x}, \widehat{y}\}$, explicadas en los subapartados A.1.1 y A.1.2 del apéndice A donde también se explica la relación entre ellas. En este trabajo, el procedimiento que se sigue para discretizar estas 6 variables continuas es el siguiente. Primero, usando el desarrollo en armónicos esféricos se pasa de las 6 variables continuas a 2 continuas, $\{x, y\}$ o $\{\rho, \alpha\}$, y 4 discretas, $\{l_x, m_x, l_y, m_y\}$, donde $\widehat{l_x}$ y $\widehat{l_y}$ son los momentos angulares orbitales asociados a las coordenadas $\vec{x}$ e $\vec{y}$, respectivamente. Si se acoplan estos dos momentos angulares orbitales, $\widehat{l_x}$ y $\widehat{l_y}$, a un momento angular orbital total $\widehat{l}$ entonces las 4 variables discretas pueden ser $\{l_x, l_y, l, m_l\}$. Si se hace un desarrollo en armónicos hiperesféricos, explicados en el apartado A.2 del apéndice A, entonces queda 1 variable continua, ρ, y 5 discretas, $\gamma \equiv \{K, l_x, l_y, l, m_l\}$, donde $\widehat{K}$ es el hipermomento o momento hiperangular, es decir, el análogo en 6D al momento angular orbital en 3 dimensiones

(3D). Finalmente si se parte de un estado inicial adecuado $R_{0\gamma}(\rho)$, que se denominará estado semilla, puede construirse una base completa $(R_{i\gamma})_i$[1] usando el método THO de la forma $R_{i\gamma}(\rho) = \frac{\mathcal{N}_{iK}}{\mathcal{N}_{0K}} R_{0\gamma}(\rho) L_i^{K+2}\left(s_\gamma^2(\rho)\right)$, donde $\left(L_i^{K+2}\right)_i$ es la familia de polinomios ortogonales relacionada con la base del oscilador armónico (Harmonic Oscillator, HO) en 6D y $\mathcal{N}_{iK}$ su constante de normalización, como se explica en el apartado A.3 del apéndice A. Pero en este caso, $R_{0\gamma}(\rho)$ ya no es necesariamente el estado fundamental del sistema. Así se discretiza la última variable continua, ρ. No obstante, en este desarrollo falta incluir las variables de espín, lo cual se detallará en el apartado siguiente.

La estructura del capítulo es la siguiente, en el apartado 3.1 se generalizará el método de discretización THO para su aplicación a un sistema compuesto por tres cuerpos. En el apartado 3.2 se aplicará dicho método de discretización al núcleo borromeo ^{6}He. Por último, en el apartado 3.3 se estudiará la convergencia del método aplicado a ^{6}He para la descripción de distintos observables de estructura como las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$.

3.1. Método de discretización

En este apartado se va a generalizar el método de discretización THO para su aplicación a un sistema de tres cuerpos que se considerarán con espines fijos. Como se va a trabajar en 6D, si se eligen las coordenadas hiperesféricas, las funciones de onda dependen de las 6 variables $\{\rho, \Omega\} = \{\rho, \alpha, \widehat{x}, \widehat{y}\}$, además de las variables de espín. En general, las funciones de onda de los autoestados de un sistema realista no van a factorizar en las partes hiperradial e hiperangular y angular. Por lo tanto el método de discretización consta de dos partes:

1. Método de armónicos hiperesféricos (Hyperspherical Harmonics, HH) [14, 37, 38]: los estados del sistema se desarrollan en armónicos hiperesféricos

$$\psi_{\beta j\mu}(\rho, \Omega) = R_{\beta j}(\rho) \sum_{\nu\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota | j\mu\rangle \kappa_I^\iota \sum_{m_l\sigma} \langle l m_l S_x \sigma | j_{ab}\nu\rangle \Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega) \chi_{S_x}^\sigma, \quad (3.1)$$

   donde $\beta \equiv \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\}$ define cada canal siendo:

   - S_x es el espín del subsistema relacionado por la coordenada $\vec{x}$,

[1] $(R_{i\gamma})_i = \{R_{i\gamma}, i = 0, \ldots, \infty\}$

- I es el espín de la partícula restante,
- $\vec{j}_{ab} = \vec{l} + \vec{S}_x$,
- $\vec{j} = \vec{j}_{ab} + \vec{I}$.

Por su parte, $\chi^{\sigma}_{S_x}$ es la función de onda de espín del subsistema relacionado por la coordenada $\vec{x}$, κ^{ι}_{I} es la función de onda de espín de la partícula restante y $R_{\beta j}(\rho)$ es la función de onda hiperradial.

En particular, el estado fundamental ligado del sistema se expresará como una combinación lineal de estos estados con un momento angular total determinado $j = j_B$

$$\psi_B(\rho,\Omega) = \sum_{\beta} R_{B\beta}(\rho) \sum_{\nu\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota | j_B\mu\rangle \kappa^{\iota}_{I} \sum_{m_l\sigma} \langle l m_l S_x \sigma | j_{ab}\nu\rangle \Upsilon^{l_x l_y}_{K l m_l}(\Omega)\chi^{\sigma}_{S_x}. \tag{3.2}$$

2. Método THO: éste es un método de discretización cuya idea básica es transformar el estado fundamental del sistema en el estado fundamental del HO. Como el estado fundamental del sistema viene dado por la ecuación anterior y la base HO viene dada por la ecuación (A.33), se tiene que el método THO se puede aplicar calculando una transformación local de escala (Local-Scaling point Transformation, LST) para cada canal β incluido en el estado fundamental, $s_\beta(\rho)$. Es decir, habrá que calcular la transformación de cada función $R_{B\beta}(\rho)$, expresada en la variable física ρ, en la función de onda del estado fundamental del HO correspondiente a ese canal β (simplemente que tenga el mismo K) $R^{HO}_{0K}(s)$, expresada en una variable s. Así la ecuación que permite calcular cada LST, $s_\beta(\rho)$, es

$$\int_0^{\rho} d\rho\ \rho'^5 |R_{B\beta}(\rho')|^2 = \int_0^{s} ds\ s'^5 |R^{HO}_{0K}(s')|^2. \tag{3.3}$$

Una vez obtenidas las diferentes transformaciones de escala, la base THO se construye aplicando la misma a la base HO, de la forma siguiente

$$R^{THO}_{i\beta}(\rho) = \frac{\mathcal{N}_{iK}}{\mathcal{N}_{0K}} R_{B\beta}(\rho) L^{K+2}_i(s_\beta(\rho)^2), \tag{3.4}$$

donde i denota la excitación hiperradial. Finalmente la base para desarrollar

los estados del sistema con $j = j_B$ es

$$\psi^{THO}_{i\beta\mu}(\rho,\Omega) = R^{THO}_{i\beta}(\rho)\sum_{\nu\iota}\langle j_{ab}\nu I\iota|j_B\mu\rangle\kappa^{\iota}_{I}\sum_{m_l\sigma}\langle lm_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\Upsilon^{l_x l_y}_{Klm_l}(\Omega)\chi^{\sigma}_{S_x}. \tag{3.5}$$

La base THO obtenida es completa y ortonormal para $j = j_B$. Los armónicos hiperesféricos cumplen la relación de ortonormalidad (A.31). Por su parte, dentro de cada canal β, las funciones hiperradiales $\left(R^{THO}_{i\beta}\right)_i$ cumplen la relación de ortonormalidad siguiente

$$\int_0^\infty d\rho\ \rho^5 R^{THO}_{i\beta}(\rho)R^{THO}_{i'\beta}(\rho) = \delta_{ii'}. \tag{3.6}$$

Se puede definir la función hiperradial $U^{THO}_{i\beta}(\rho)$, de la forma siguiente

$$U^{THO}_{i\beta}(\rho) = \rho^{5/2}R^{THO}_{i\beta}(\rho), \tag{3.7}$$

de tal modo que la relación de ortonormalidad quede

$$\int_0^\infty d\rho\ U^{THO}_{i\beta}(\rho)U^{THO}_{i'\beta}(\rho) = \delta_{ii'}. \tag{3.8}$$

3.1.1. Canales no incluidos en el estado fundamental

Como el estado fundamental corresponde a un determinado valor del momento angular total $j = j_B$, realizando el proceso descrito se genera una base completa y ortonormal para los estados con $j = j_B$. Queda pendiente la generación de una base para los estados con $j \neq j_B$. En ese caso hay que definir estados semillas para generar dicha base. Como la única información disponible son los diferentes canales incluidos en el estado fundamental, se partirá de ellos intentando que la correspondencia entre el canal para el que se quiere construir la base y el canal tomado del estado fundamental sean lo más similares posibles. En consecuencia se han adoptado los siguientes criterios:

1. El valor de K debe ser el mismo porque el comportamiento de las funciones hiperradiales $R_{\beta j}(\rho)$ cerca del origen va como ρ^K; si esto no es posible entonces se tomará una función con $K-1$ y se multiplicará por ρ.

2. Dentro de lo posible se tomará el canal que tenga el máximo número de números cuánticos iguales en el orden siguiente: l_x, l_y, l, S_x; el motivo de este

orden es la importancia de los mismos en el comportamiento del sistema. En concreto, se considera que la correlación entre las partículas relacionadas por la coordenada $\vec{x}$ es especial importancia.

Así, se obtendrá una base THO para cada momento angular j y cada canal β de la forma siguiente

$$\psi^{THO}_{i\beta j\mu}(\rho,\Omega) = R^{THO}_{i\beta}(\rho)\sum_{\nu\iota}\langle j_{ab}\nu I\iota|j\mu\rangle\kappa^{\iota}_{I}\sum_{m_l\sigma}\langle lm_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\Upsilon^{l_x l_y}_{Klm_l}(\Omega)\chi^{\sigma}_{S_x}, \quad (3.9)$$

donde $R^{THO}_{i\beta}(\rho)$ se obtiene como

$$R^{THO}_{i\beta}(\rho) = \frac{\mathcal{N}_{iK}}{\mathcal{N}_{0K}}R_{0\beta}(\rho)L^{K+2}_{i}(s_{\beta j}(\rho)^2), \quad (3.10)$$

siendo $R_{0\beta}(\rho)$ la función semilla obtenida de la forma descrita. Nótese que el procedimiento descrito para generar la función semilla, $R_{0\beta}(\rho)$, la hace independiente de j. Pero de este modo, se obtiene una base completa y ortonormal $\forall j$.

Una vez construida la base THO, en realidad una base THO para cada canal β y cada valor de j, se puede tomar una base finita con n_b excitaciones hiperradiales en cada base y diagonalizar el hamiltoniano del sistema en ella. Los autoestados así obtenidos serán

$$\phi^{j\mu}_{n}(\rho,\Omega) = \sum_{\beta i} C^{i\beta j}_{n}\psi^{THO}_{i\beta j\mu}(\rho,\Omega). \quad (3.11)$$

En este apartado se ha generalizado el método de discretización THO para su aplicación a un sistema de tres cuerpos. Para ello, primero se hace un desarrollo en HH de la función de onda del estado fundamental y después se aplica el método THO a cada canal incluido en el mismo. Para canales no incluidos en el estado fundamental se elige, siguiendo una serie de reglas, un estado semilla a partir de los canales incluidos en el estado fundamental que es la única información de la que se parte para la aplicación del método de discretización.

3.2. Aplicación al núcleo ^{6}He

El método descrito en el apartado anterior se va a aplicar al núcleo de ^{6}He que es un núcleo borromeo, es decir, que se puede considerar formado por tres cuerpos sin la existencia de subsistemas binarios ligados. De esta forma se interpreta como formado por un core[2], partícula α, más dos neutrones de valencia. El

[2]El core se considera inerte y en el caso de la partícula α tiene espín cero.

estado fundamental de este núcleo corresponde a $j^\pi = 0^+$. Para expresar tanto los operadores como las funciones de onda, en este trabajo, se elige el sistema de Jacobi **T** representado en la figura 3.1, en el cual los dos neutrones de valencia son las partículas relacionadas por la coordenada $\vec{x}$.

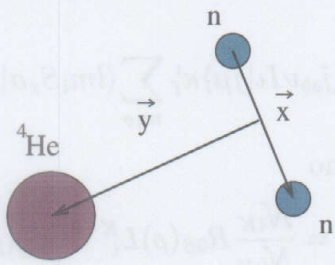


Figura 3.1: *Sistema de Jacobi T.*

3.2.1. Hamiltoniano del núcleo ^{6}He

Una vez sustraída la contribución del centro de masas, el hamiltoniano se expresa de la forma siguiente

$$\widehat{H}(\vec{x},\vec{y}) = \widehat{T}(\vec{x},\vec{y}) + \widehat{V}(\vec{x},\vec{y}), \tag{3.12}$$

donde $\widehat{T}(\vec{x},\vec{y})$ es la energía cinética

$$\widehat{T}(\vec{x},\vec{y}) = \widehat{t}_x(\vec{x}) + \widehat{t}_y(\vec{y}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_x^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_y^2 \tag{3.13}$$

y $\widehat{V}(\vec{x},\vec{y})$ es el potencial. Cada una de las partes de la energía cinética es separable en una parte radial y una parte angular (cada una es un problema de 3D) como sigue

$$\widehat{t}_x(\vec{x}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{x}\frac{d^2}{dx^2}x - \frac{\widehat{l}_x^2}{x^2}\right], \tag{3.14}$$

$$\widehat{t}_y(\vec{y}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{y}\frac{d^2}{dy^2}y - \frac{\widehat{l}_y^2}{y^2}\right], \tag{3.15}$$

donde $\widehat{l}_x$ y $\widehat{l}_y$ son los operadores momento angular orbital asociados a las coordenadas $\vec{x}$ e $\vec{y}$ respectivamente.

De forma alternativa el hamiltoniano se puede expresar utilizando las coordenadas hiperesféricas de la forma siguiente

$$\widehat{H}(\rho,\Omega) = \widehat{T}(\rho,\Omega) + \widehat{V}(\rho,\Omega), \tag{3.16}$$

donde

$$\widehat{T}(\rho,\Omega) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{5}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} - \frac{1}{\rho^2}\widehat{K}^2(\Omega)\right], \tag{3.17}$$

siendo $\widehat{K}(\Omega)$ el momento hiperangular dado por la ecuación (A.24) y m una masa de normalización arbitraria que se toma como la masa del nucleón. Cuando la función de onda sobre la que actúa el hamiltoniano está factorizada en una parte hiperradial y otra hiperangular, siendo la parte hiperradial $U(\rho) = \rho^{5/2}R(\rho)$ y la parte hiperangular los armónicos hiperesféricos, entonces el operador energía cinética adopta la forma

$$\widehat{T}_U(\rho) = -\frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{15/4 + K(K+4)}{\rho^2}\right]. \tag{3.18}$$

Por otra parte, el potencial, según se encuentra implementado en el programa FaCE [140] utilizado en este trabajo, es suma de potenciales a dos cuerpos más un potencial efectivo a tres cuerpos que se utiliza para ajustar a los valores experimentales. Una descripción general de las interacciones implementadas en este programa se recoge en el apartado C.2 del apéndice C. Para este trabajo en concreto, el potencial $n+\alpha$ es suma de un potencial central más un potencial de espín-órbita que se expresan con un potencial de Woods-Saxon y uno derivado de Woods-Saxon, respectivamente,

$$V_c(r) = \frac{v_c}{1+\exp\left[\frac{r-r_c}{a_c}\right]}, \tag{3.19}$$

$$V_{so}(r) = \frac{v_{so}}{r a_{so}}\frac{\exp\left[\frac{r-r_{so}}{a_{so}}\right]}{\left[1+\exp\left[\frac{r-r_{so}}{a_{so}}\right]\right]^2}. \tag{3.20}$$

En el caso del potencial central se incluyen las ondas s, p y d con los valores siguientes

	v_c(MeV)	r_c(fm)	a_c(fm)
s	48,0	2,0	0,7
p	−43,0	2,0	0,7
d	−21,5	2,0	0,7

mientras que los valores para el potencial espín-órbita son

v_{so}(MeV)	r_{so}(fm)	a_{so}(fm)
−40,0	1,5	0,35

En este punto cabe comentar que el principio de Pauli se tiene en cuenta utilizando el método del potencial de fase equivalente explicado en el subapartado 1.2.2. Como se considera que los neutrones del core ^{4}He están en estados s, en el potencial a dos cuerpos de onda s habrá un estado ligado que estará prohibido para los neutrones del halo y esto se consigue introduciendo un potencial repulsivo ajustado de forma que reproduzca los corrimientos de fase experimentales.

Por su parte, el potencial $n+n$ es suma de un potencial central más un potencial de espín-órbita y más un potencial tensorial que se expresan con gaussianas,

$$V_c(r) = \sum_{k=1}^{3} v_c^k \exp\left[-\left(\frac{r}{r_c^k}\right)^2\right], \tag{3.21}$$

$$V_{so}(r) = v_{so} \exp\left[-\left(\frac{r}{r_{so}}\right)^2\right], \tag{3.22}$$

$$V_t(r) = \sum_{k=1}^{3} v_t^k \exp\left[-\left(\frac{r}{r_t^k}\right)^2\right]. \tag{3.23}$$

De nuevo, en el caso del potencial central se incluyen las ondas s, p y d con los valores siguientes

	v_c^1(MeV)	r_c^1(fm)	v_c^2(MeV)	r_c^2(fm)	v_c^3(MeV)	r_c^3(fm)
s	560,0	0,8109	−390,7	1,031	−1,501	3,205
p	9,335	1,184	−1,37	2,099	0,1663	3,193
d	560,0	0,8109	−390,7	1,031	−1,501	3,205

mientras los valores para el potencial espín-órbita son

v_{so}(MeV)	r_{so}(fm)
−114,5	0,9296

y, por último, los valores del potencial tensorial

v_t^1(MeV)	r_t^1(fm)	v_t^2(MeV)	r_t^2(fm)	v_t^3(MeV)	r_t^3(fm)
12,24	1,539	−31,64	0,4039	0,8111	3,015

Finalmente el potencial a tres cuerpos tiene una forma potencial,

$$V_{3b}(r) = \frac{v_{3b}}{\left[1 + \left(\frac{\rho}{r_{3b}}\right)^{a_{3b}}\right]}. \tag{3.24}$$

En función del valor de j^π se toma un valor diferente para ajustar a los diferentes datos experimentales. Por ello, estos valores dependerán también del valor máximo del momento hiperangular, K, que se tome en el cálculo. Se van a considerar dos casos, $K_{max} = 20$ y $K_{max} = 8$. Para el primero se tiene

j^π	v_{3b}(MeV)	r_{3b}(fm)	a_{3b}
0^+	−2,4	5,0	3
1^-	−0,85	5,0	3
2^+	−0,85	5,0	3

y para el segundo

j^π	v_{3b}(MeV)	r_{3b}(fm)	a_{3b}
0^+	−3,05	5,0	3
1^-	−1,70	5,0	3
2^+	−1,70	5,0	3

De esta forma se obtiene un estado fundamental ligado correspondiente a $j^\pi = 0^+$, cortando en $K_{max} = 20$, con una energía de ligadura $\varepsilon_B = -0{,}954882$ MeV y cortando en $K_{max} = 8$, con una energía de ligadura $\varepsilon_B = -0{,}952428$ MeV, mientras que la energía de ligadura experimental es $\varepsilon_B = -0{,}973$ MeV. Por su parte, los casos $j^\pi = 1^-, 2^+$ se toman para ajustar la resonancia 2^+ que es conocida y cuyo valor experimental es $\varepsilon_R = 0{,}824$ MeV. El número de canales que resulta para $j^\pi = 0^+$ es $N_{can} = 66$, para $j^\pi = 1^-$ es $N_{can} = 155$ y para $j^\pi = 2^+$ es $N_{can} = 265$, en el caso de $K_{max} = 20$. Mientras que que en el caso de $K_{max} = 8$, el número de canales que resulta para $j^\pi = 0^+$ es $N_{can} = 15$, para $j^\pi = 1^-$ es $N_{can} = 26$ y para $j^\pi = 2^+$ es $N_{can} = 46$.

3.2.2. Estado fundamental del núcleo ^{6}He

Lo único que hace falta para la aplicación del método de discretización es conocer la función de onda del estado fundamental del sistema. En el caso del núcleo ^{6}He, ésta no se conoce analíticamente pero puede obtenerse numéricamente. En

este caso se obtiene, como ya se ha comentado, a partir del potencial implementado por el programa FaCE [140] y haciendo uso de una base sturmiana [76–78], generada reescalando los potenciales diagonales de cada canal e implementada en el programa sturmxx [141].

En este capítulo se va utilizar el estado fundamental de $K_{max} = 20$ cuya energía de ligadura es $\varepsilon_B = -0{,}954882$ MeV. En la tabla 3.1 se muestra la contribución de cada uno de los 66 canales de $j^\pi = 0^+$ a la norma del estado fundamental. Se puede ver cómo los tres primeros canales y especialmente el segundo son los que tienen una mayor contribución. Nótese cómo los canales con $K = 2$ dan la máxima contribución a la función de onda, un 91 %. También se puede extraer que la contribución de los canales hasta $K = 8$ es del 99 %. Por último se puede comentar cómo los términos singlete ($S_x = 0$) dan una contribución del 86 % mientras que los términos triplete ($S_x = 1$) del 14 %.

Tabla 3.1: *Contribución a la norma del estado fundamental de los diferentes canales incluidos en él.* $\beta \equiv \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\}$.

β	norma
$\{0,0,0,0,0,0\}$	$0{,}48731\ 10^{-1}$
$\{2,0,0,0,0,0\}$	0,78585
$\{2,1,1,1,1,0\}$	0,12143
$\{4,2,2,0,0,0\}$	$0{,}55478\ 10^{-2}$
$\{4,0,0,0,0,0\}$	$0{,}28051\ 10^{-3}$
$\{4,1,1,1,1,0\}$	$0{,}18897\ 10^{-2}$
$\{6,2,2,0,0,0\}$	$0{,}15431\ 10^{-1}$
$\{6,0,0,0,0,0\}$	$0{,}88195\ 10^{-4}$
$\{6,3,3,1,1,0\}$	$0{,}87863\ 10^{-2}$
$\{6,1,1,1,1,0\}$	$0{,}31347\ 10^{-3}$
$\{8,4,4,0,0,0\}$	$0{,}42390\ 10^{-3}$
$\{8,2,2,0,0,0\}$	$0{,}24327\ 10^{-2}$
$\{8,0,0,0,0,0\}$	$0{,}35301\ 10^{-2}$
$\{8,3,3,1,1,0\}$	$0{,}47015\ 10^{-3}$

Continúa en la página siguiente

Tabla 3.1 – continuación de la página anterior

β	norma
$\{8,1,1,1,1,0\}$	$0{,}30544\ 10^{-4}$
$\{10,4,4,0,0,0\}$	$0{,}86677\ 10^{-3}$
$\{10,2,2,0,0,0\}$	$0{,}27675\ 10^{-3}$
$\{10,0,0,0,0,0\}$	$0{,}74340\ 10^{-3}$
$\{10,5,5,1,1,0\}$	$0{,}95217\ 10^{-3}$
$\{10,3,3,1,1,0\}$	$0{,}52591\ 10^{-4}$
$\{10,1,1,1,1,0\}$	$0{,}23371\ 10^{-5}$
$\{12,6,6,0,0,0\}$	$0{,}53419\ 10^{-4}$
$\{12,4,4,0,0,0\}$	$0{,}36975\ 10^{-3}$
$\{12,2,2,0,0,0\}$	$0{,}31832\ 10^{-3}$
$\{12,0,0,0,0,0\}$	$0{,}12348\ 10^{-3}$
$\{12,5,5,1,1,0\}$	$0{,}11019\ 10^{-3}$
$\{12,3,3,1,1,0\}$	$0{,}29503\ 10^{-4}$
$\{12,1,1,1,1,0\}$	$0{,}35662\ 10^{-5}$
$\{14,6,6,0,0,0\}$	$0{,}68490\ 10^{-4}$
$\{14,4,4,0,0,0\}$	$0{,}11910\ 10^{-4}$
$\{14,2,2,0,0,0\}$	$0{,}69005\ 10^{-6}$
$\{14,0,0,0,0,0\}$	$0{,}15082\ 10^{-3}$
$\{14,7,7,1,1,0\}$	$0{,}12990\ 10^{-3}$
$\{14,5,5,1,1,0\}$	$0{,}59461\ 10^{-5}$
$\{14,3,3,1,1,0\}$	$0{,}13382\ 10^{-6}$
$\{14,1,1,1,1,0\}$	$0{,}20234\ 10^{-6}$
$\{16,8,8,0,0,0\}$	$0{,}78087\ 10^{-5}$
$\{16,6,6,0,0,0\}$	$0{,}55356\ 10^{-4}$
$\{16,4,4,0,0,0\}$	$0{,}55212\ 10^{-4}$
$\{16,2,2,0,0,0\}$	$0{,}32965\ 10^{-4}$
$\{16,0,0,0,0,0\}$	$0{,}13125\ 10^{-3}$
$\{16,7,7,1,1,0\}$	$0{,}23872\ 10^{-4}$
$\{16,5,5,1,1,0\}$	$0{,}88935\ 10^{-5}$
$\{16,3,3,1,1,0\}$	$0{,}19751\ 10^{-5}$

Continúa en la página siguiente

Tabla 3.1 – continuación de la página anterior

β	norma
$\{16,1,1,1,1,0\}$	$0{,}11579\ 10^{-6}$
$\{18,8,8,0,0,0\}$	$0{,}62222\ 10^{-5}$
$\{18,6,6,0,0,0\}$	$0{,}12660\ 10^{-6}$
$\{18,4,4,0,0,0\}$	$0{,}77643\ 10^{-6}$
$\{18,2,2,0,0,0\}$	$0{,}15034\ 10^{-5}$
$\{18,0,0,0,0,0\}$	$0{,}65063\ 10^{-4}$
$\{18,9,9,1,1,0\}$	$0{,}19598\ 10^{-4}$
$\{18,7,7,1,1,0\}$	$0{,}47092\ 10^{-6}$
$\{18,5,5,1,1,0\}$	$0{,}21576\ 10^{-7}$
$\{18,3,3,1,1,0\}$	$0{,}46017\ 10^{-7}$
$\{18,1,1,1,1,0\}$	$0{,}47594\ 10^{-7}$
$\{20,10,10,0,0,0\}$	$0{,}12130\ 10^{-5}$
$\{20,8,8,0,0,0\}$	$0{,}82725\ 10^{-5}$
$\{20,6,6,0,0,0\}$	$0{,}82179\ 10^{-5}$
$\{20,4,4,0,0,0\}$	$0{,}55617\ 10^{-5}$
$\{20,2,2,0,0,0\}$	$0{,}29228\ 10^{-5}$
$\{20,0,0,0,0,0\}$	$0{,}45435\ 10^{-4}$
$\{20,9,9,1,1,0\}$	$0{,}48724\ 10^{-5}$
$\{20,7,7,1,1,0\}$	$0{,}19997\ 10^{-5}$
$\{20,5,5,1,1,0\}$	$0{,}58589\ 10^{-6}$
$\{20,3,3,1,1,0\}$	$0{,}11428\ 10^{-6}$
$\{20,1,1,1,1,0\}$	$0{,}30403\ 10^{-7}$

En la figura 3.2 se muestran las funciones de onda hiperradiales, $U_{B\beta}(\rho)$, para los tres canales β más importantes incluidos en el estado fundamental de $K_{max} = 20$. Se puede ver como estas funciones no presentan ningún nodo. En particular, la función de onda de $K = 0$ no presenta nodo porque se ha utilizado el método del potencial de fase equivalente para el tratamiento del principio de Pauli. También se observa cómo las funciones se extienden a distancias grandes, $\rho \sim 20$ fm, poniendo de manifiesto que se trata de un sistema débilmente ligado.

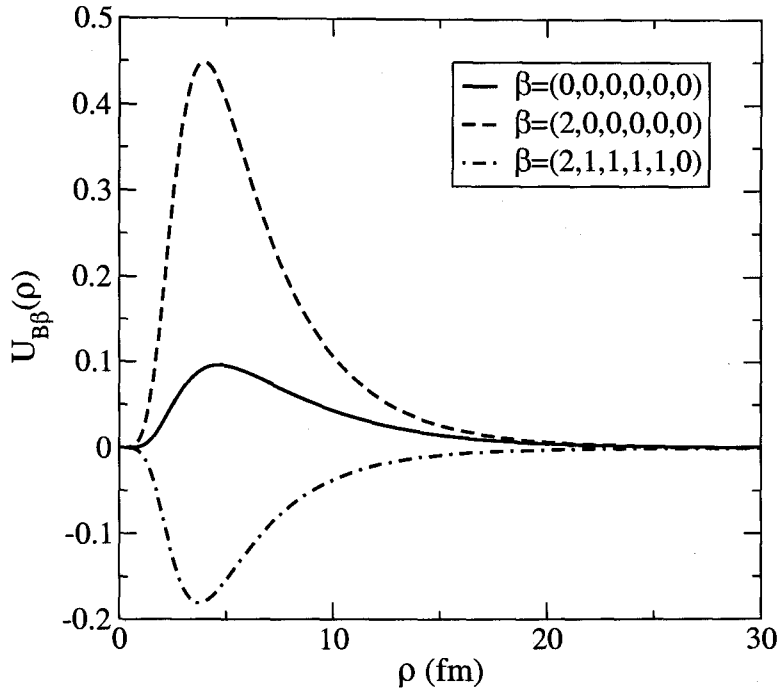


Figura 3.2: *Funciones de onda hiperradiales de los tres canales más importantes incluidas en el estado fundamental.* $\beta \equiv \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\}$.

3.2.3. Aplicación del método THO

Para aplicar el método THO el primer paso es calcular la LST. Para calcular dicha transformación para un determinado momento angular total j y para un canal β hay que resolver la ecuación (3.3) que, generalizada para $j \neq j_B$, es

$$\int_0^\rho d\rho' \ \rho'^5 |R_{0\beta}(\rho')|^2 = \int_0^s ds \ s'^5 |R_{0K}^{HO}(s')|^2. \tag{3.25}$$

Si se toma la función de onda hiperradial como $U = \rho^{5/2} R$ se tiene

$$\int_0^\rho d\rho' |U_{0\beta}(\rho')|^2 = \int_0^s ds' |U_{0K}^{HO}(s')|^2. \tag{3.26}$$

Cuando ρ, s son relativamente grandes y las integrales se aproximan a 1, es necesario usar la ecuación complementaria

$$\int_\rho^\infty d\rho' |U_{0\beta}(\rho')|^2 = \int_s^\infty ds' |U_{0K}^{HO}(s')|^2. \tag{3.27}$$

Al igual que en el caso de dos cuerpos se utiliza una variable intermedia z para calcular la transformación. En este caso, el cálculo se ha separado en las dos regiones siguientes:

1. Hasta $\rho = 30$ fm:

$$z\rho_\beta(\rho) = \int_0^\rho d\rho' |U_{0\beta}(\rho')|^2 \text{ numéricamente,} \tag{3.28}$$

$$zs_K(s) = \int_0^s ds' |U_{0K}^{HO}(s')|^2 = 1 - \frac{\Gamma(K+3, s^2)}{\Gamma(K+3)}. \tag{3.29}$$

2. Desde $\rho = 30$ fm:

$$z\rho c_\beta(\rho) = \int_\rho^\infty d\rho' |U_{0\beta}(\rho')|^2 = c_\beta^2 \exp(-\rho), \tag{3.30}$$

$$zsc_K(s) = \int_s^\infty ds' |U_{K0}^{HO}(s')|^2 = \frac{\Gamma(K+3, s^2)}{\Gamma(K+3)}. \tag{3.31}$$

Aquí se tiene:

- Función gamma

$$\Gamma(n) = \int_0^\infty t^{n-1} \exp(-t) dt = (n-1)!. \tag{3.32}$$

- Función gamma incompleta

$$\Gamma(n, x) = \int_x^\infty t^{n-1} \exp(-t) dt = (n-1)! \exp(-x) \sum_{i=0}^{n-1} \frac{x^i}{i!}. \tag{3.33}$$

- Comportamiento asintótico de la función de onda del estado fundamental para $\rho > 30$ fm

$$U_{0\beta}(\rho) = c_\beta \exp(-\kappa\rho), \tag{3.34}$$

donde

$$\kappa = \sqrt{\frac{2m|\varepsilon_B|}{\hbar^2}}. \tag{3.35}$$

Una vez calculadas las variables intermedias, $s_\beta(\rho)$ se obtiene interpolando

$$\{\{zs_K(s), s\}, z\rho_\beta(\rho)\} \to s_\beta(\rho) \quad \rho < 30 \text{ fm}, \tag{3.36}$$

$$\{\{zsc_K(s), s\}, z\rho c_\beta(\rho)\} \to s_\beta(\rho) \quad \rho > 30 \text{ fm}. \tag{3.37}$$

En la figura 3.3 se muestran las LST, $s_\beta(\rho)$, para los tres canales más importantes incluidos en el estado fundamental. Se puede observar cómo para valores pequeños de ρ el comportamiento es aproximadamente lineal mientras que para valores

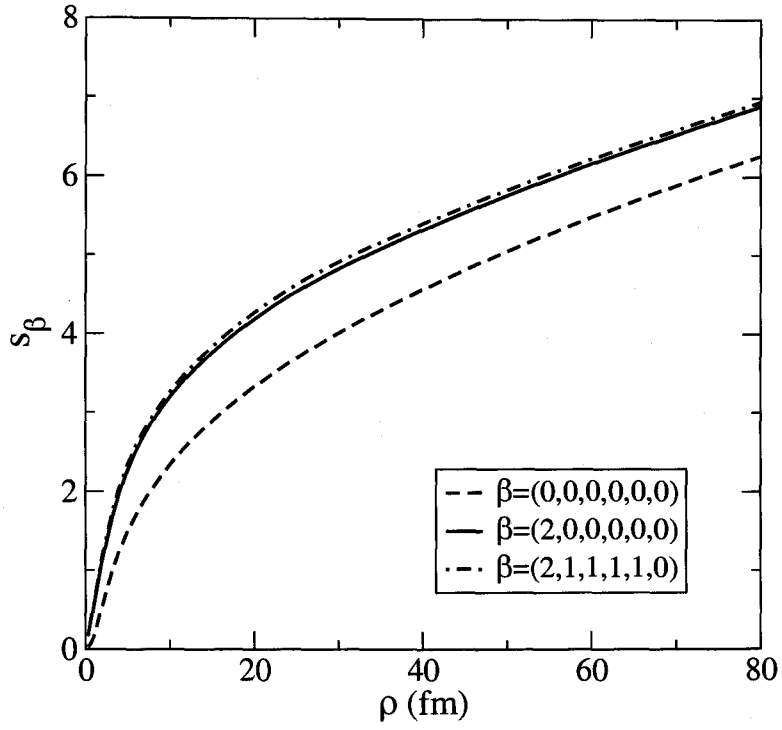


Figura 3.3: *Transformaciones locales de escala para los tres canales más importantes incluidos en el estado fundamental.* $\beta \equiv \{K, l_x, l_y, l, S_x, j_{ab}\}$.

grandes de ρ el comportamiento es cuadrático. Éstas son una muestra de las 66 transformaciones de escala que se calculan para $j^\pi = 0^+$. Por su parte para $j^\pi = 1^-$ se calculan otras 155 y para $j^\pi = 2^+$ se calculan otras 265 más.

Una vez calculadas las diferentes LST se puede construir la base THO según la ecuación (3.9) y su parte hiperradial según (3.10). En la figura 3.4 se presentan las primeras cinco funciones de onda de la base THO para el canal más importante incluido en el estado fundamental, $\beta = \{2, 0, 0, 0, 0, 0\}$, que contribuye con el 79 % a la norma total. Aquí i denota la excitación hiperradial. En esta base el estado $i = 0$ reproduce la componente incluida en el estado fundamental. Se puede observar cómo los estados THO se extienden cada vez más conforme aumenta i al mismo tiempo que también oscilan cada vez más.

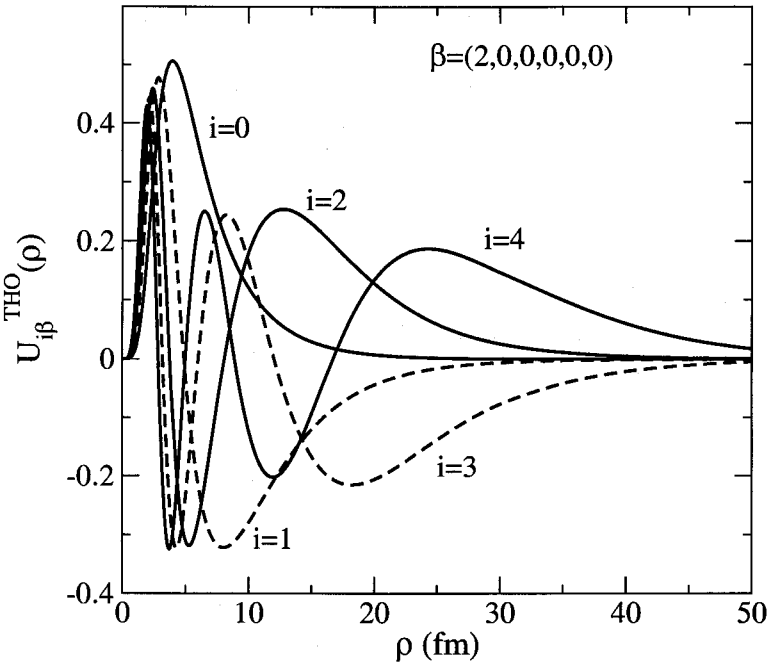


Figura 3.4: *Primeras cinco funciones de onda de la base THO para el canal* $\beta = \{2,0,0,0,0,0\}$ *incluido en el estado fundamental.*

3.2.4. Diagonalización del hamiltoniano en la base THO

Una vez generadas las diferentes bases THO se puede proceder al cálculo de los elementos de matriz del hamiltoniano del núcleo ^{6}He, dado por la ecuación (3.16), en dicha base. Si el ket $|THO, i\beta j\mu\rangle$ denota la función de onda THO dada por la ecuación (3.9), se tiene que

$$\langle THO, i\beta j\mu|\widehat{T}|THO, i'\beta' j'\mu'\rangle = \langle THO, i\beta j|\widehat{T}|THO, i'\beta j\rangle \delta_{\beta\beta'}\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}, \quad (3.38)$$

es decir, la energía cinética no mezcla diferentes canales β ni diferentes momentos angulares totales j y sus proyecciones μ. De esta manera sólo hay que calcular los elementos de matriz dentro de cada canal β y como las funciones de onda de la base THO factorizan en una parte hiperradial, $U_{i\beta}^{THO}(\rho)$, y otra hiperangular

que son los armónicos hiperesféricos se tiene

$$\begin{aligned}
\langle THO, i\beta j|\widehat{T}(\rho,\Omega)|THO, i'\beta' j\rangle &= \int_0^\infty d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho)\widehat{T}_U(\rho)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\
&= \frac{\mathcal{N}_{iK}\mathcal{N}_{i'K}}{\mathcal{N}_{0K}^2}\left[\int_0^\infty d\rho \frac{dU_{0\beta}(\rho)}{d\rho}^2 L_i^{K+2}\left(s_\beta(\rho)^2\right) L_{i'}^{K+2}\left(s_\beta(\rho)^2\right)\right. \\
&+ \int_0^\infty d\rho\, U_{0\beta j}(\rho)^2 L_{i-1}^{K+3}\left(s_\beta(\rho)^2\right) L_{i'-1}^{K+3}\left(s_\beta(\rho)^2\right)\left(2s_\beta(\rho)\frac{ds_\beta(\rho)}{d\rho}\right)^2 \\
&- \int_0^\infty d\rho \frac{dU_{0\beta}(\rho)}{d\rho} U_{0\beta}(\rho) L_{i-1}^{K+3}\left(s_\beta(\rho)^2\right) L_{i'}^{K+2}\left(s_\beta(\rho)^2\right) 2s_\beta(\rho)\frac{ds_\beta(\rho)}{d\rho} \\
&- \int_0^\infty d\rho \frac{dU_{0\beta}(\rho)}{d\rho} U_{0\beta}(\rho) L_i^{K+2}\left(s_\beta(\rho)^2\right) L_{i'-1}^{K+3}\left(s_\beta(\rho)^2\right) 2s_\beta(\rho)\frac{ds_\beta(\rho)}{d\rho} \\
&\left.+ (15/4 + K(K+4))\int_0^\infty d\rho \frac{U_{0\beta}(\rho)^2}{\rho^2} L_i^{K+2}\left(s_\beta(\rho)^2\right) L_{i'}^{K+2}\left(s_\beta(\rho)^2\right)\right],
\end{aligned} \tag{3.39}$$

donde $\widehat{T}_U(\rho)$ viene dado por la ecuación (3.18). En este trabajo, estas integrales se han realizado usando una cuadratura de Laguerre con n_{lag} puntos y para ello sólo hay que calcular las funciones $U_{0\beta}(\rho), s_\beta(\rho)$ y sus derivadas en los puntos de cuadratura.

Por su parte, para los elementos de matriz del potencial se tiene que

$$\langle THO, i\beta j\mu|\widehat{V}(\rho,\Omega)|THO, i'\beta' j'\mu'\rangle = \langle THO, i\beta j|\widehat{V}(\rho,\Omega)|THO, i'\beta' j\rangle\delta_{jj'}\delta_{\mu\mu'}, \tag{3.40}$$

es decir, el potencial sí mezcla los diferentes canales β pero no los diferentes momentos angulares totales j y sus proyecciones μ. Así, los elementos de matriz del potencial en la base THO son

$$\langle THO, i\beta j|\widehat{V}(\rho,\Omega)|THO, i'\beta' j\rangle = \int_0^\infty d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho)V_{\beta\beta'}^j(\rho)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho), \tag{3.41}$$

donde los elementos $V_{\beta\beta'}^j(\rho)$ son los elementos de matriz hiperangulares del potencial que son calculados con el código FaCE [140] en los puntos de cuadratura hiperradiales, ya que estas integrales también se realizan usando una cuadratura de Laguerre con n_{lag} puntos.

El proceso del cálculo de estas integrales es el siguiente, como en el problema no hay una única familia de polinomios generalizados de Laguerre, $L_i^A(x)$, se toma la cuadratura correspondiente a los polinomios generalizados de Laguerre con $\mathcal{A} = 5$ de manera que la función peso sea

$$w(x) = x^5 \exp(-x), \tag{3.42}$$

con objeto de extraer el jacobiano ρ^5 de las integrales. También se realiza la transformación $x = \lambda z$, donde λ es sólo una constante que se introduce para obtener la mejor precisión en el cálculo de las integrales. Por su parte $\rho = \mathcal{S}z$, donde $\mathcal{S}$ es una escala en unidades de longitud que sirve para adimensionalizar ρ. Se define como $\mathcal{S} = \frac{1}{2\kappa} = 2{,}33$ fm, donde κ es una constante que viene dada por la ecuación (3.35). Así para una integral del tipo

$$\text{int} = \int_0^\infty d\rho\, U^{THO}_{i\beta}(\rho) f(\rho) U^{THO}_{i'\beta'}(\rho) = \int_0^\infty d\rho\, \rho^5 R^{THO}_{i\beta}(\rho) f(\rho) R^{THO}_{i'\beta'}(\rho), \quad (3.43)$$

se tiene

$$\begin{aligned} \text{int} &= \frac{\mathcal{S}}{\lambda} \int_0^\infty dx\, U^{THO}_{i\beta}(\mathcal{S}x/\lambda) f(\mathcal{S}x/\lambda) U^{THO}_{i'\beta'}(\mathcal{S}x/\lambda) \\ &= \left(\frac{\mathcal{S}}{\lambda}\right)^6 \int_0^\infty dx\, x^5 R^{THO}_{i\beta}(\mathcal{S}x/\lambda) f(\mathcal{S}x/\lambda) R^{THO}_{i'\beta'}(\mathcal{S}x/\lambda) \end{aligned} \quad (3.44)$$

y aplicando la cuadratura

$$\begin{aligned} \text{int} &\approx \frac{\mathcal{S}}{\lambda} \sum_{k=1}^{n_{lag}} \frac{w_k}{x_k^5 \exp(-x_k)} U^{THO}_{i\beta}(\mathcal{S}x_k/\lambda) f(\mathcal{S}x_k/\lambda) U^{THO}_{i'\beta'}(\mathcal{S}x_k/\lambda) \\ &= \left(\frac{\mathcal{S}}{\lambda}\right)^6 \sum_{k=1}^{n_{lag}} \frac{w_k}{\exp(-x_k)} R^{THO}_{i\beta}(\mathcal{S}x_k/\lambda) f(\mathcal{S}x_k/\lambda) R^{THO}_{k\beta' j'}(\mathcal{S}x_k/\lambda), \end{aligned} \quad (3.45)$$

donde los pesos w_k son

$$w_k = \frac{(n_{lag}+5)!}{n_{lag}!} \frac{x_k}{(n_{lag}+5)^2 L^5_{n_{lag}-1}(x_k)^2} \quad (3.46)$$

y $\{x_k, k = 1, \ldots, n_{lag}\}$ son los puntos de cuadratura, es decir, los puntos en los cuales el polinomio generalizado de Laguerre con $\mathcal{A} = 5$ de orden n_{lag} se anula. Se pueden redefinir los pesos $w'_k = \mathcal{S}w_k/(\lambda x_k^5 \exp(-x_k))$ y los puntos $\rho_k = \mathcal{S}x_k/\lambda$, de manera que se tenga

$$\text{int} \approx \sum_{k=1}^{n_{lag}} w'_k U^{THO}_{i\beta}(\rho_k) f(\rho_k) U^{THO}_{i'\beta'}(\rho_k). \quad (3.47)$$

En este trabajo se han tomado los valores $n_{lag} = 60$ y $\lambda = 3$.

Una vez calculados los elementos de matriz del hamiltoniano en la base THO se puede tomar una base finita con n_b excitaciones hiperradiales en cada canal, es decir, con $n_t = (n_b + 1) \times N_{can}$ estados, siendo N_{can} el número de canales

para un determinado valor del momento angular total j y diagonalizar en ella el hamiltoniano. Repitiendo el proceso conforme aumenta n_b se puede representar el espectro de energía como una función de n_b. En la figura 3.5 se ha representado el espectro de energía para $j^\pi = 0^+$ por debajo de $\varepsilon = 10$ MeV porque por encima hay grados de libertad no tenidos en cuenta en este modelo. Se puede observar cómo se recupera casi exactamente el estado fundamental ligado del sistema y cómo conforme aumenta n_b hay más niveles próximos al umbral de ruptura ($\varepsilon = 0$ MeV) al mismo tiempo que otros niveles alcanzan energías más altas.

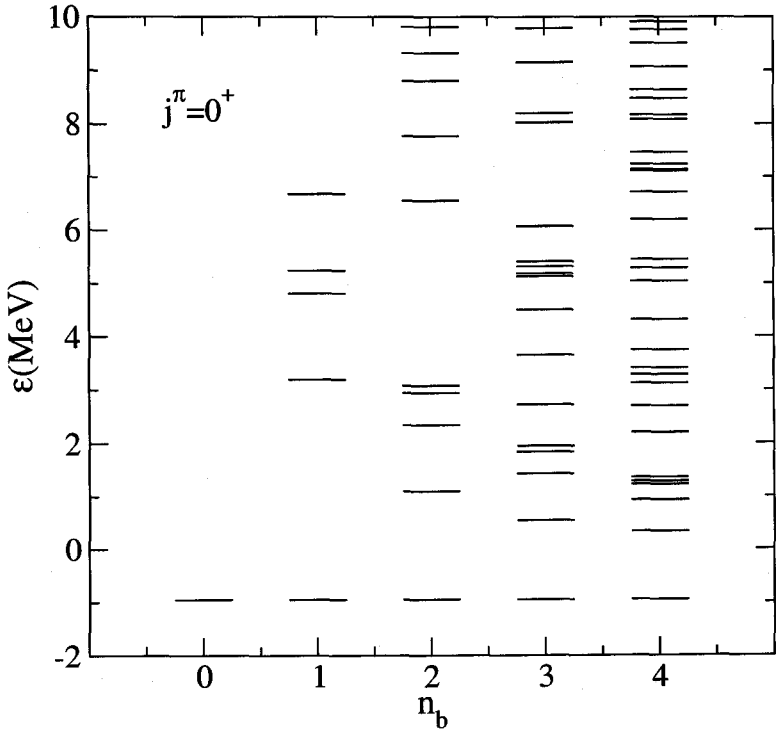


Figura 3.5: *Autovalores de los estados $j^\pi = 0^+$ por debajo de $\varepsilon = 10$ MeV.*

En la figura 3.6 se presenta el espectro de energía para $j^\pi = 1^-$. En este caso se puede ver cómo los estados más bajos en energía se aproximan cada vez más al umbral de ruptura conforme n_b aumenta.

En la figura 3.7 se presenta el espectro de energía para $j^\pi = 2^+$. En este caso se puede ver cómo aparece un estado muy estable en torno a la energía experimental de la resonancia 2^+ de ^{6}He, $\varepsilon_R = 0{,}824$ MeV. Así que este único estado podría representar la resonancia.

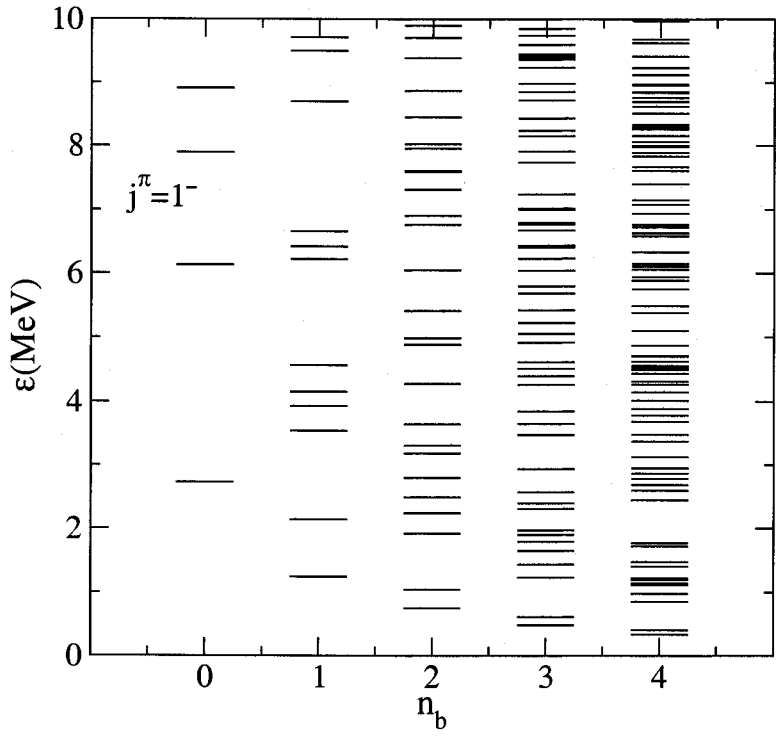


Figura 3.6: *Autovalores de los estados* $j^\pi = 1^-$ *por debajo de* $\varepsilon = 10$ *MeV.*

En este apartado se ha aplicado el método de discretización desarrollado en el apartado anterior al núcleo borromeo ^{6}He. Se parte de su función de onda del estado fundamental y se genera la base THO para estados con momento angular total $j^\pi = 0^+, 1^-, 2^+$. A continuación, se diagonaliza el hamiltoniano del sistema y se obtienen los correspondientes espectros de energía, que presentan las mismas características que en los casos de 1D y 3D. En particular, el espectro de $j = 2^+$ presenta un estado muy estable en torno a la energía experimental de la resonancia 2^+, con lo cual este único estado podría ser representativo de la resonancia.

3.3. Funciones de intensidad

Para estudiar la convergencia de la base THO, se va a comenzar por el estudio de magnitudes relacionadas con la estructura como son la funciones de intensidad. Para un operador $\widehat{O}$ se definen los siguientes observables que acoplan el estado

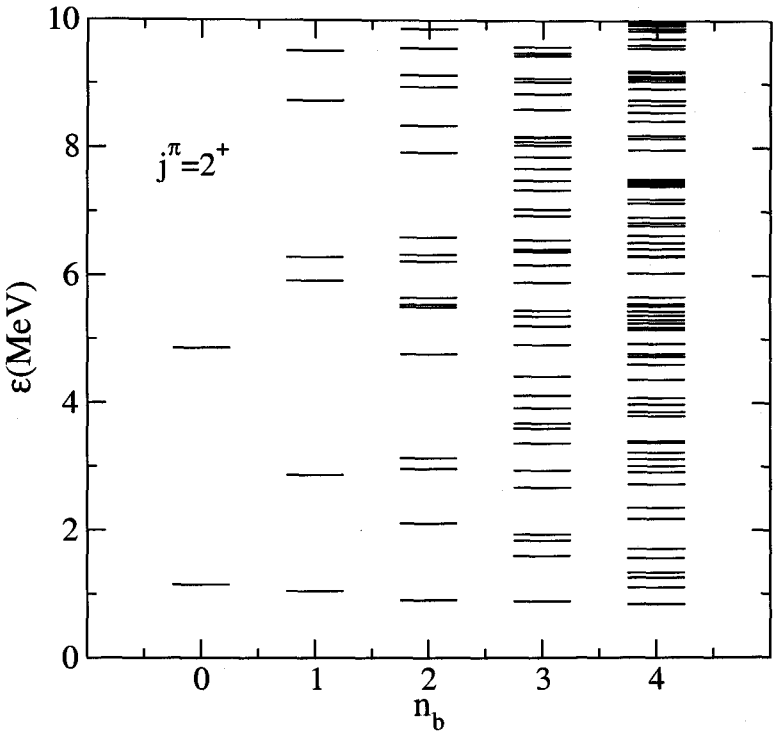


Figura 3.7: *Autovalores de los estados $j^\pi = 2^+$ por debajo de $\varepsilon = 10$ MeV.*

fundamental ($n = 1, j^\pi = 0^+, \mu = 0$) con los estados excitados con momento angular j^π y proyección μ:

- Intensidad total

$$S_T(\widehat{O}, n_t) = \sum_n^{n_t} |\langle nj\mu|\widehat{O}|100\rangle|^2, \tag{3.48}$$

donde n suma sobre todos los estados excitados con momento angular j^π y proyección μ hasta n_t. En el límite de un número muy grande de estados n_t, se obtiene la regla de suma

$$S_T(\widehat{O}) = \lim_{n_t\to\infty} S_T(\widehat{O}, n_t) = \langle 100|\widehat{O}^2|100\rangle - |\langle 100|\widehat{O}|100\rangle|^2. \tag{3.49}$$

- Suma pesada en la energía

$$E_w(\widehat{O}, n_t) = \sum_n^{n_t} (\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{10})|\langle nj\mu|\widehat{O}|100\rangle|^2, \tag{3.50}$$

donde ε_{nj} es la energía del autoestado n con momento angular j.

- Polarizabilidad

$$\alpha(\widehat{O}, n_t) = \sum_{n}^{n_t} (\varepsilon_{nj} - \varepsilon_{10})^{-1} |\langle nj\mu|\widehat{O}|100\rangle|^2. \tag{3.51}$$

Aquí el ket $|nj\mu\rangle$ denota la función de onda dada por la ecuación (3.11).

En primer lugar se toma el operador $\widehat{O} = \rho^2$ que conecta el estado fundamental con el resto de estados $j^\pi = 0^+$. Los resultados se muestran en la tabla 3.2. En ella se presenta, como función del número de excitaciones hiperradiales n_b, en la segunda columna la energía del estado fundamental, en la tercera columna el valor esperado de ρ^2 en el estado fundamental, en la cuarta columna la intensidad total desde el estado fundamental, que debería converger a la quinta columna según la regla de suma (3.49), en la sexta columna la razón entre la suma pesada en la energía y la intensidad total $\langle E(n_t)\rangle = E_w(n_t)/S_T(n_t)$ y en la séptima columna la razón entre la polarizabilidad y la intensidad total $\langle E^{-1}(n_t)\rangle = \alpha(n_t)/S_T(n_t)$. En las columnas segunda y tercera se observa cómo el estado fundamental es muy estable conforme aumenta n_b y cómo la energía del estado fundamental disminuye ligeramente. Respecto al resto de columnas, se puede ver cómo cada columna converge rápidamente conforme n_b aumenta y cómo la cuarta columna converge a la quinta de acuerdo con la regla de suma. Esto indica que la base THO es muy eficiente para describir el estado fundamental a través del operador monopolar ρ^2 que tiene un rango relativamente largo. De la columna sexta se obtiene que la energía relevante del continuo en este proceso está en torno a 3 MeV por encima del umbral de ruptura.

3.3.1. Probabilidad de transición reducida $B(E\lambda)$

Siguiendo la notación y las definiciones de Brink y Satchler [142], el operador multipolar eléctrico $\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}(\vec{r})$ se define como

$$\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}(\vec{r}) = \left(\frac{4\pi}{2\lambda+1}\right)^{1/2} Z\, e\, r^\lambda Y_{\lambda M_\lambda}(\hat{r}), \tag{3.52}$$

donde e es la carga del electrón. Para un núcleo con un core y dos neutrones de valencia, Z es el número atómico del sistema y $\vec{r} = \vec{y}\sqrt{ma_y}/m_c$ es la posición del core (partícula cargada) respecto al centro de masas del sistema siendo m_c la masa del core. Para el núcleo ^{6}He, $Z = 2$ y $\vec{r} = \vec{y}/(2\sqrt{3})$ en el sistema de Jacobi **T**.

Tabla 3.2: *Convergencia de diferentes observables conforme la base THO aumenta: energía del estado fundamental calculada (e_B), valor esperado en el estado fundamental para ρ^2 ($\langle\rho^2\rangle_B$), intensidad total desde el estado fundamental (S_T) para el operador ρ^2, esta columna debería converger a la columna etiquetada $\langle\rho^4\rangle_B - \langle\rho^2\rangle_B^2$ de acuerdo con la regla de suma, la razón entre la suma pesada en la energía y la intensidad total ($\langle E(n_t)\rangle$) y la razón entre la polarizabilidad y la intensidad total ($\langle E^{-1}(n_t)\rangle$).*

n_b	e_B (MeV)	$\langle\rho^2\rangle_B$ (fm^2)	S_T (fm^4)	$\langle\rho^4\rangle_B - \langle\rho^2\rangle_B^2$ (fm^4)	$\langle E\rangle$ (MeV)	$\langle E^{-1}\rangle$ (MeV^{-1})
0	−0,954882	30,63	41,6	855	27,8	0,0433
1	−0,954884	30,60	738	853	5,72	0,194
2	−0,954885	30,62	851	856	3,08	0,364
3	−0,954885	30,62	855	855	3,01	0,426
4	−0,954886	30,62	854	854	3,00	0,433

La probabilidad de transición reducida se define como

$$B(E\lambda)_{nj,n'j'} = B(E\lambda; nj \to n'j') = |\langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle|^2 \left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right), \tag{3.53}$$

donde el elemento de matriz reducido $\langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle$, tras el desarrollo algebraico realizado en el apartado B.1 del apéndice B, es

$$\begin{aligned}
\langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle &= (-1)^{j+2j'}\hat{j}'Z\,e\left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda \\
&\times \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \delta_{l_x l'_x}\delta_{S_x S'_x}\delta_{jj_{ab}}\delta_{j'j'_{ab}}\hat{l}_y\hat{l}'_y\hat{l}\hat{l}'(-1)^{l_x+S_x} \\
&\times \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} W(ll'l_y l'_y;\lambda l_x) W(jj'll';\lambda S_x) \\
&\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^\lambda \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho),
\end{aligned} \tag{3.54}$$

donde se ha tenido en cuenta que el core tiene espín $I = 0$ y por tanto $j_{ab} = j$.

También se pueden calcular las reglas de suma de las transiciones eléctricas desde el estado fundamental $(1,0)$ a los estados (n,j), $\sum_n B(E\lambda)_{10,nj}$. Tras el

desarrollo algebraico realizado en el apartado B.2 del apéndice B se obtiene, para $\lambda = 1$ que la regla de suma de $B(E1)$ es

$$S_T^{SR}(E1) = \sum_n B(E1)_{10,n1} = \frac{3}{4\pi}\frac{Z^2e^2ma_y}{m_c^2}\langle 100|y^2|100\rangle \tag{3.55}$$

y para $\lambda = 2$ que la regla de suma de $B(E2)$ es

$$S_T^{SR}(E2) = \sum_n B(E2)_{10,n2} = \frac{5}{4\pi}\frac{Z^2e^2m^2a_y^2}{m_c^4}\langle 100|y^4|100\rangle. \tag{3.56}$$

En las tablas 3.3 y 3.4 se presentan los resultados obtenidos para el núcleo ^{6}He incluyendo en los cálculos los estados hasta 10 MeV por encima del umbral de ruptura. Estas tablas incluyen para $B(E\lambda)$, como función del número de excitaciones hiperradiales n_b, la intensidad total en la segunda columna, la suma pesada en la energía en la tercera columna, la razón entre estas dos en la cuarta y la polarizabilidad en la quinta. Se puede observar cómo cada columna converge rápidamente conforme n_b aumenta. De la cuarta columna se obtiene que la energía promedio relevante para la transición $E1$ está en torno a 4,35 MeV y para $E2$ en torno a 3,58 MeV. Por otro lado, las reglas de suma para la intensidad total son

$$S_T^{SR}(E1) = 1{,}500\ \mathrm{e^2fm^2}, \tag{3.57}$$
$$S_T^{SR}(E2) = 9{,}99\ \mathrm{e^2fm^4}, \tag{3.58}$$

que no son alcanzados en la tabla porque la suma es hasta $\varepsilon = 10$ MeV. Si se hace la suma completa se obtiene

$$S_T(E1) = 1{,}498\ \mathrm{e^2fm^2}, \tag{3.59}$$
$$S_T(E2) = 9{,}59\ \mathrm{e^2fm^4}, \tag{3.60}$$

que son valores muy próximos a las correspondientes reglas de suma. Esto indica que la base utilizada es suficientemente completa.

3.3.2. Distribuciones de $B(E\lambda)$

Llegado a este punto se quiere definir una distribución de $B(E\lambda)$ a partir de los valores discretos $B(E\lambda)_{10,nj}$. En general, un pseudoestado será una superposición

Tabla 3.3: *Convergencia de diferentes observables conforme la base THO aumenta: intensidad total para las excitaciones $E1$ desde el estado fundamental ($\sum_n B(E1)_{10,n1}$), suma pesada en la energía (E_w), razón entre estas dos magnitudes ($\langle E\rangle = E_w/\sum_n B(E1)_{10,n1}$) y polarizabilidad($\alpha$) por debajo de $\varepsilon = 10MeV$.*

n_b	$\sum_n B(E1)_{10,n1}$ (e^2fm^2)	E_w (e^2fm^2MeV)	$\langle E\rangle$ (MeV)	α ($e^2fm^2MeV^{-1}$)
0	1,297	5,38	4,15	0,422
1	1,323	5,71	4,32	0,403
2	1,323	5,76	4,36	0,403
3	1,321	5,76	4,36	0,402
4	1,320	5,75	4,35	0,402

Tabla 3.4: *Lo mismo que para la tabla 3.3 pero para las transiciones $E2$.*

n_b	$\sum_n B(E2)_{10,n2}$ (e^2fm^4)	E_w (e^2fm^4MeV)	$\langle E\rangle$ (MeV)	α ($e^2fm^4MeV^{-1}$)
0	3,51	14,5	4,09	1,21
1	6,89	27,6	4,01	2,37
2	8,41	31,1	3,70	3,06
3	8,47	30,5	3,60	3,20
4	8,41	30,1	3,58	3,19

de estados del continuo con energías próximas a las de éste. Se pueden elegir diferentes modos para asignar una distribución de energía a un pseudoestado. Uno de ellos es considerar una base "grande" como referencia, tomando la aproximación de que esta base es exacta. Se va a llamar $N_t = (N_b + 1) \times N_{can}$ al número de estados de la base grande, siendo N_b el número de excitaciones hiperradiales. En esta base una distribución $f_N(\varepsilon, \varepsilon_N)$, que puede ser gaussiana, lorentziana, de Poisson,..., se asigna a cada estado discreto $N = 1, \ldots, N_t$ con una anchura que es una función creciente de la energía.

Si ahora se considera una base más pequeña, donde n_t es el número de estados en la base pequeña, se tiene que los estados $n = 1, \ldots, n_t$ en la base pequeña se pueden desarrollar en la base grade como

$$|n\rangle = \sum_N C(n, N)|N\rangle. \tag{3.61}$$

Así que si se quiere obtener una distribución $f_n(\varepsilon, \varepsilon_n)$ para los estados de la base pequeña se tiene

$$\begin{aligned} f_n(\varepsilon, \varepsilon_n) = |\langle\varepsilon|n\rangle|^2 = \sum_{NN'} \langle N|\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|N'\rangle C(n, N)C(n, N')^* \approx \\ \sum_N |\langle\varepsilon|N\rangle|^2 |C(n, N)|^2 = \sum_N f_N(E, E_N)|C(n, N)|^2, \end{aligned} \tag{3.62}$$

donde se ha considerado que para la base grande los términos no diagonales son pequeños comparados con los diagonales.

Del mismo modo si se quiere obtener una distribución para $B(E\lambda)$ se tiene una expresión como

$$\begin{aligned} |\langle gs|\widehat{O}|\varepsilon\rangle|^2 &= \langle gs|\widehat{O}|\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|\widehat{O}|gs\rangle \approx \sum_{nn'} \langle gs|\widehat{O}|n\rangle\langle n|\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|n'\rangle\langle n'|\widehat{O}|gs\rangle \\ &= \sum_{nn'} \langle gs|\widehat{O}|n\rangle\langle n'|\widehat{O}|gs\rangle \sum_{NN'} \langle N|\varepsilon\rangle\langle\varepsilon|N'\rangle C(n, N)C(n', N')^* \\ &\approx \sum_{nn'} \langle gs|\widehat{O}|n\rangle\langle n'|\widehat{O}|gs\rangle \sum_N C(n, N) f_N(\varepsilon, \varepsilon_N) C(n', N)^* \\ &= \sum_N f_N(\varepsilon, \varepsilon_N) SO(N) SO(N)^*, \end{aligned} \tag{3.63}$$

donde $SO(N)$ es

$$SO(N) = \sum_n \langle gs|\widehat{O}|n\rangle C(n, N). \tag{3.64}$$

En este trabajo $f_N(\varepsilon, \varepsilon_N)$ se ha aproximado por una distribución de Poisson

$$P(\varepsilon) = C\varepsilon^m \exp(-\kappa\varepsilon). \tag{3.65}$$

Para determinar C y κ se imponen dos condiciones

$$\int_0^\infty P(\varepsilon)d\varepsilon = 1, \tag{3.66}$$

$$\int_0^\infty \varepsilon P(\varepsilon)d\varepsilon = \varepsilon_N. \tag{3.67}$$

De ese modo se tiene

$$C = \frac{(m+1)^{(m+1)}}{\varepsilon_N^{(m+1)} m!}, \tag{3.68}$$

$$\kappa = \frac{m+1}{\varepsilon_N}. \tag{3.69}$$

Si ahora se quiere determinar la anchura de la distribución se llega a

$$\Gamma = \sqrt{\langle\varepsilon^2\rangle - \langle\varepsilon\rangle^2} = \frac{\varepsilon_N}{\sqrt{m+1}}, \tag{3.70}$$

de manera que conforme aumenta m se tiene una distribución más estrecha.

En este trabajo se ha tomado una base grande con $N_b = 15$ y una distribución de Poisson con $m = 20$. En las figuras 3.8 y 3.9 se presenta la completitud $F(\varepsilon)$ para la base grande y para los estados con $j^\pi = 1^-$ y $j^\pi = 2^+$, respectivamente. La completitud se define como la suma de $P(\varepsilon)$ sobre todos los estados excitados. En el caso de $j^\pi = 2^+$ se ha usado un valor de $m = 1300$ en la zona en torno a la resonancia para obtener una anchura consistente con el valor experimental, $\Gamma_R = 0{,}113$ MeV. Se observa en ambos casos cómo las bases son particularmente adecuadas para describir los efectos de baja energía del continuo.

En las figuras 3.10 y 3.11 se presentan las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$ hasta 10 MeV para una base con $n_b = 4$. No se presentan cálculos para diferentes dimensiones de la base THO porque son prácticamente indistinguibles. Para comparar, se muestran las distribuciones calculadas con funciones de onda del continuo de dispersión [46, 51]. Para $B(E1)$ ambas distribuciones están en buen acuerdo con un máximo en torno a $\varepsilon = 1{,}2$ MeV y con la misma intensidad total. Para las distribuciones de $B(E2)$ el hecho más relevante es la aparición de una resonancia estrecha a baja energía. En ambos cálculos la profundidad de la

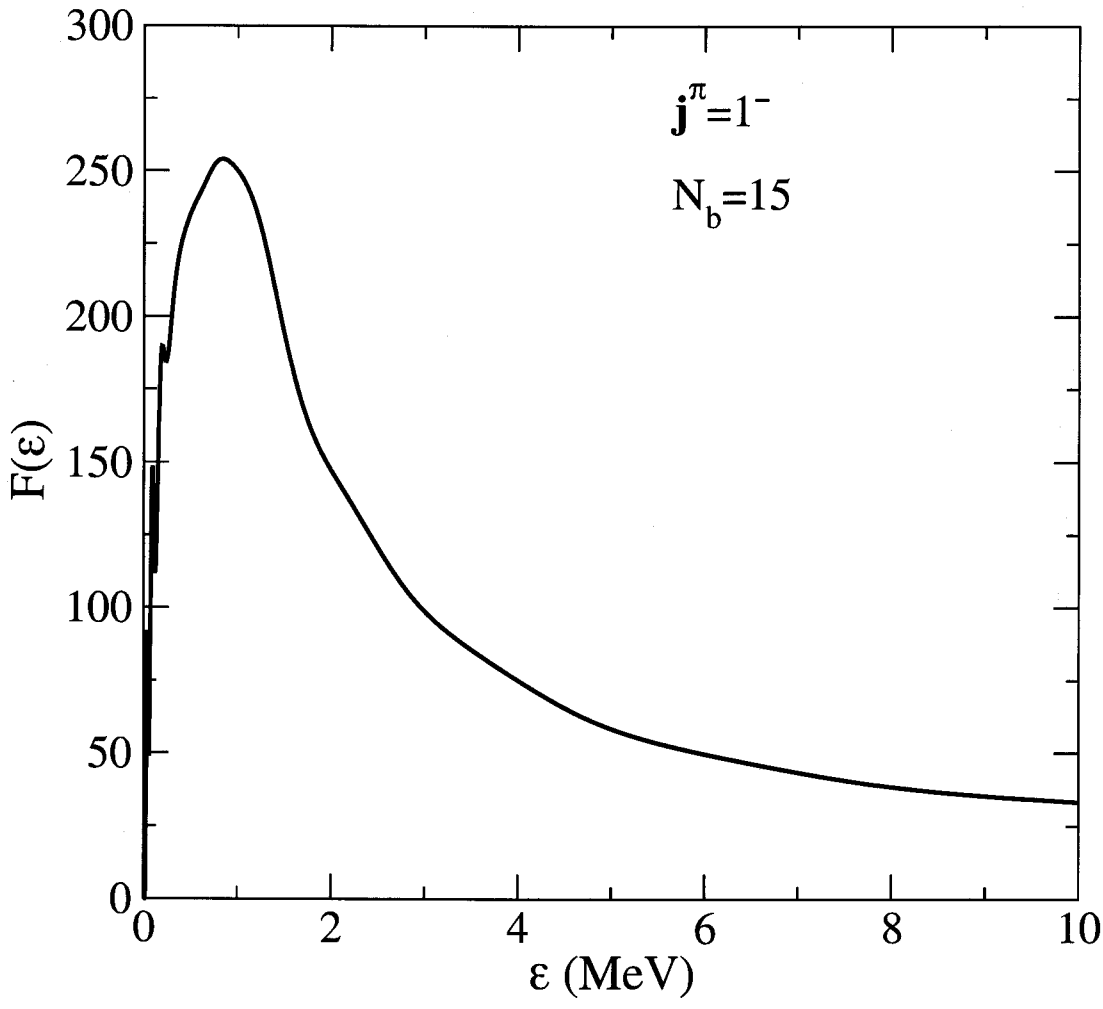


Figura 3.8: *Completitud de la base con $N_b = 15$ para estados con $j^\pi = 1^-$, usando una distribución de Posisson con $m = 20$.*

interacción a tres cuerpos fue ajustada para reproducir aproximadamente la posición experimental de la resonancia $\varepsilon_R = 0{,}824$ MeV. De nuevo se encuentra un buen acuerdo entre ambas tanto en forma como en la intensidad total. El cálculo THO muestra un pequeño máximo por debajo de la resonancia que no aparece en el cálculo con las funciones del continuo de dispersión. Esta pequeña diferencia se debe al tratamiento arbitrario con una distribución de Poisson estrecha que se hace a todos los pesudoestados en torno a la energía de la resonancia. En la figura 3.12 , aparte de la distribución $B(E2)$ completa, se ha superpuesto la contribución del autoestado $j^\pi = 2^+$ que aparece en torno a la energía de la

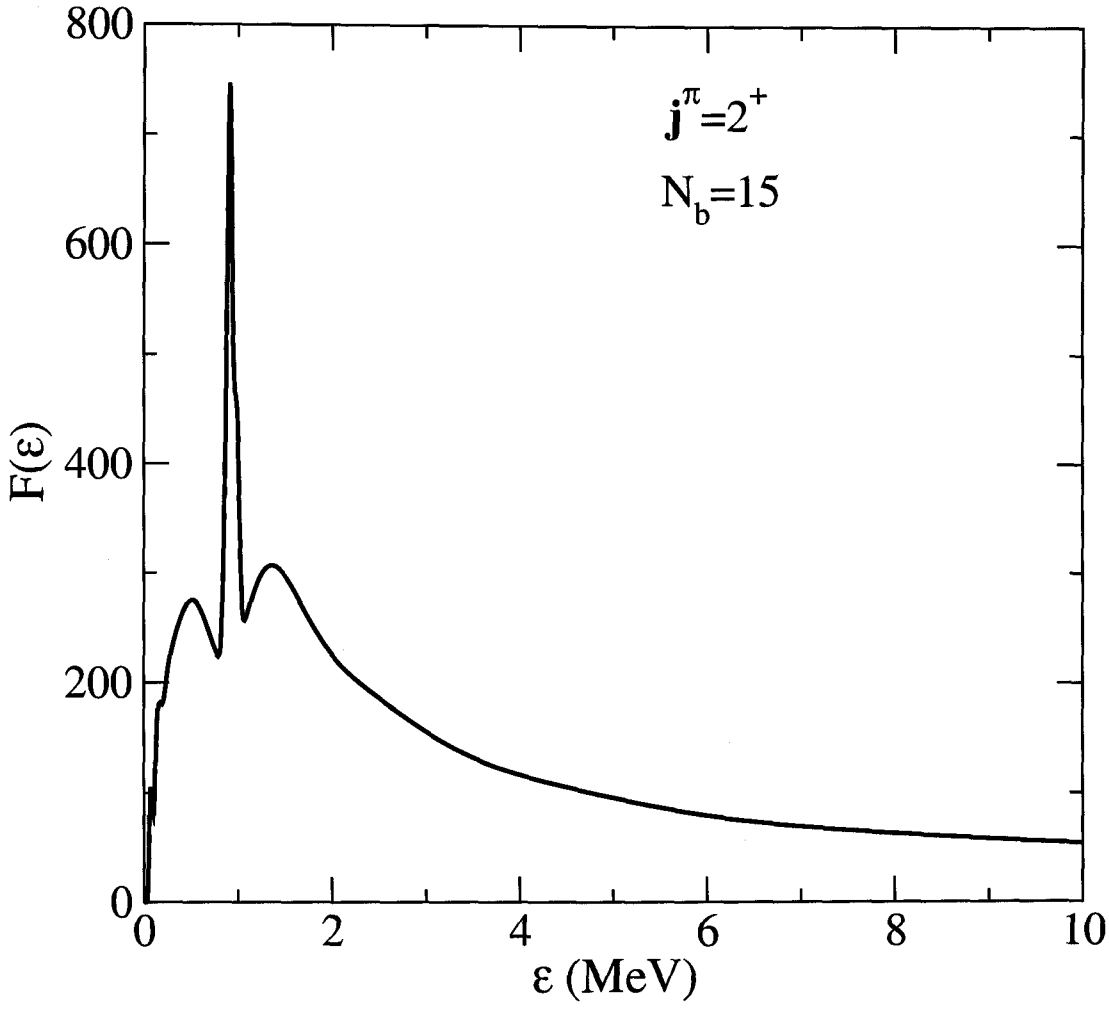


Figura 3.9: *Completitud de la base con* $N_b = 15$ *para estados con* $j^{\pi} = 2^{+}$, *usando una distribución de Posisson con* $m = 20$ *y con* $m = 1300$ *en torno a la energía de la resonancia.*

resonancia en el cálculo THO para $n_b = 4$. Este único estado reproduce muy bien el pico resonante, con lo cual se puede concluir que este estado representa a la resonancia.

En este apartado se ha estudiado la convergencia de distintos observables de estructura como el operador ρ^2 y las transiciones $E1$ y $E2$. En todos los casos se observa una rápida convergencia en la base THO de las correspondientes funciones de intensidad. También se han presentado las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$ suavizadas y se han comparado con un cálculo realizado con funciones de onda

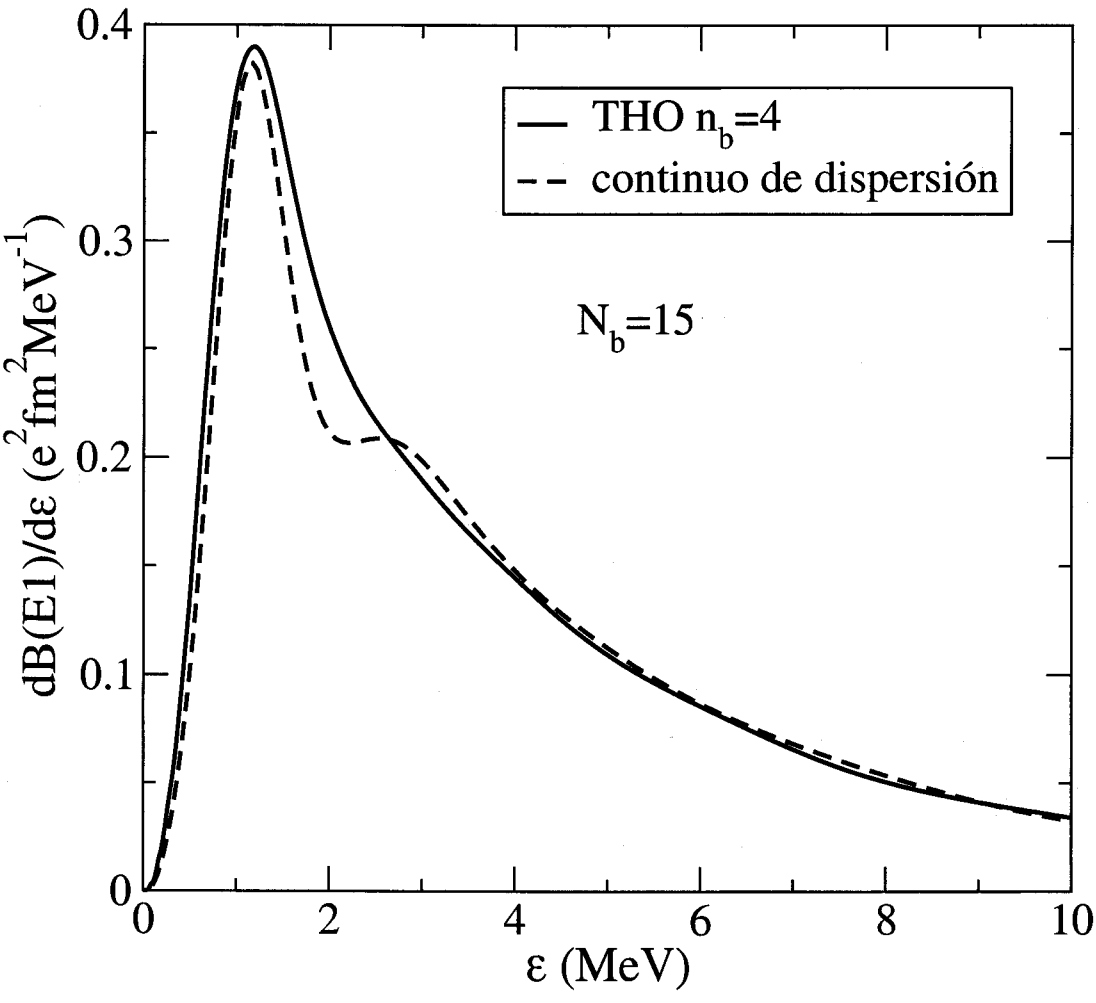


Figura 3.10: *Distribución de $B(E1)$ para $n_b = 4$ con $n_t = (n_b + 1) \times N_{can}$, usando una distribución de Posisson con $m = 20$. Se compara con la distribución calculada con funciones de onda del continuo de dispersión [46].*

del continuo de dispersión. La comparación muestra que ambos cálculos están en buen acuerdo tanto para la transición $E1$ como $E2$. Del caso $E2$ se obtiene que el autoestado de $j^\pi = 2^+$ que estaba en torno a la energía de la resonancia, efectivamente, reproduce el efecto de ésta.

***

En este capítulo se ha presentado la generalización del método de discretización THO para su aplicación a un sistema de tres cuerpos. Posteriormente se

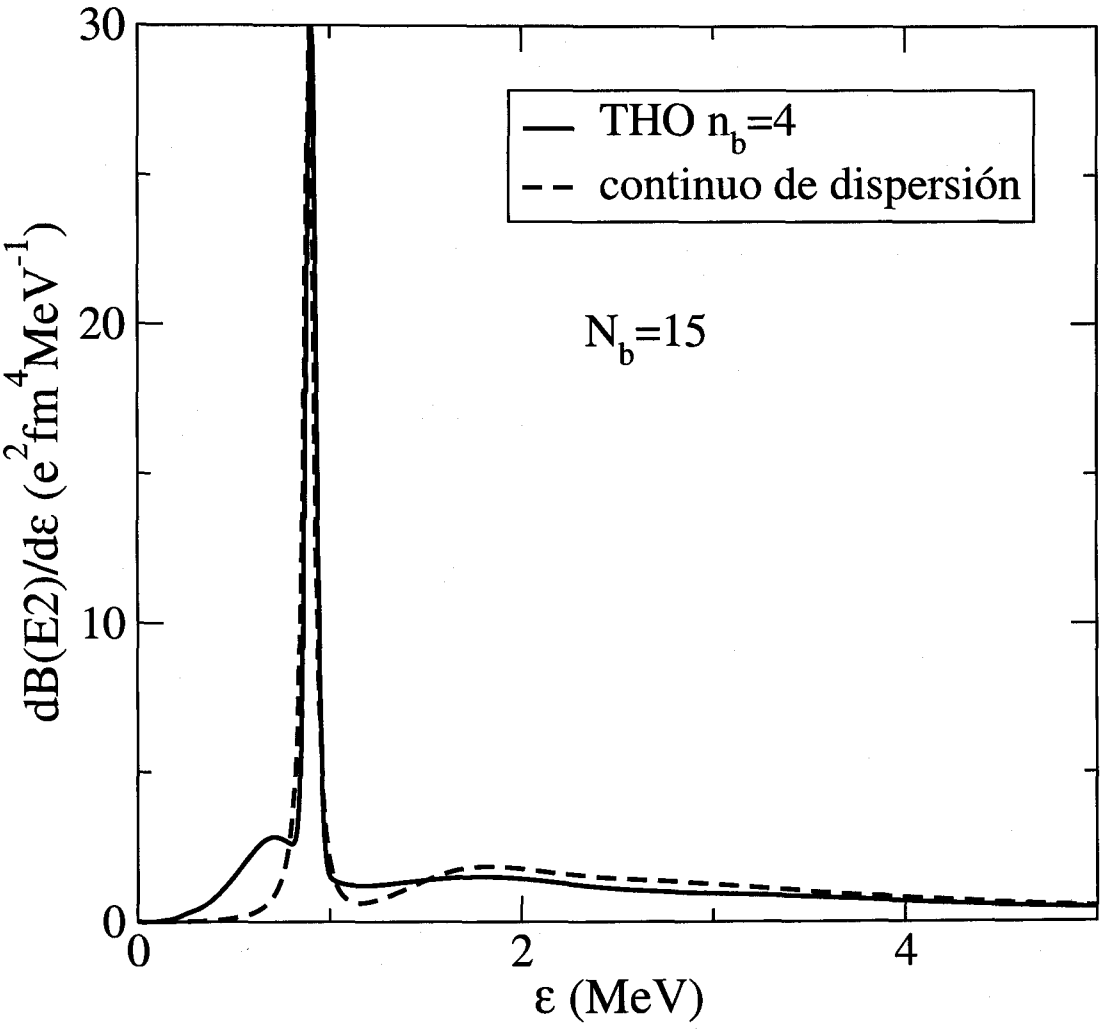


Figura 3.11: *Distribución de $B(E2)$ para $n_b = 4$ con $n_t = (n_b + 1) \times N_{can}$, usando una distribución de Posisson con $m = 20$ y con $m = 1300$ en torno a la energía de la resonancia. Se compara con la distribución calculada con funciones de onda del continuo de dispersión [46].*

ha aplicado este formalismo al núcleo borromeo ^{6}He y se han realizado diversos cálculos de estructura para estudiar la convergencia de la base THO. Se ha comprobado cómo una base THO con un número de estados relativamente bajo es suficiente para describir el efecto del continuo de diferentes observables como las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$. Con lo cual se puede concluir que la base THO es apropiada para el estudio de sistemas de tres cuerpos. Estos resultados se recogen en el artículo [143].

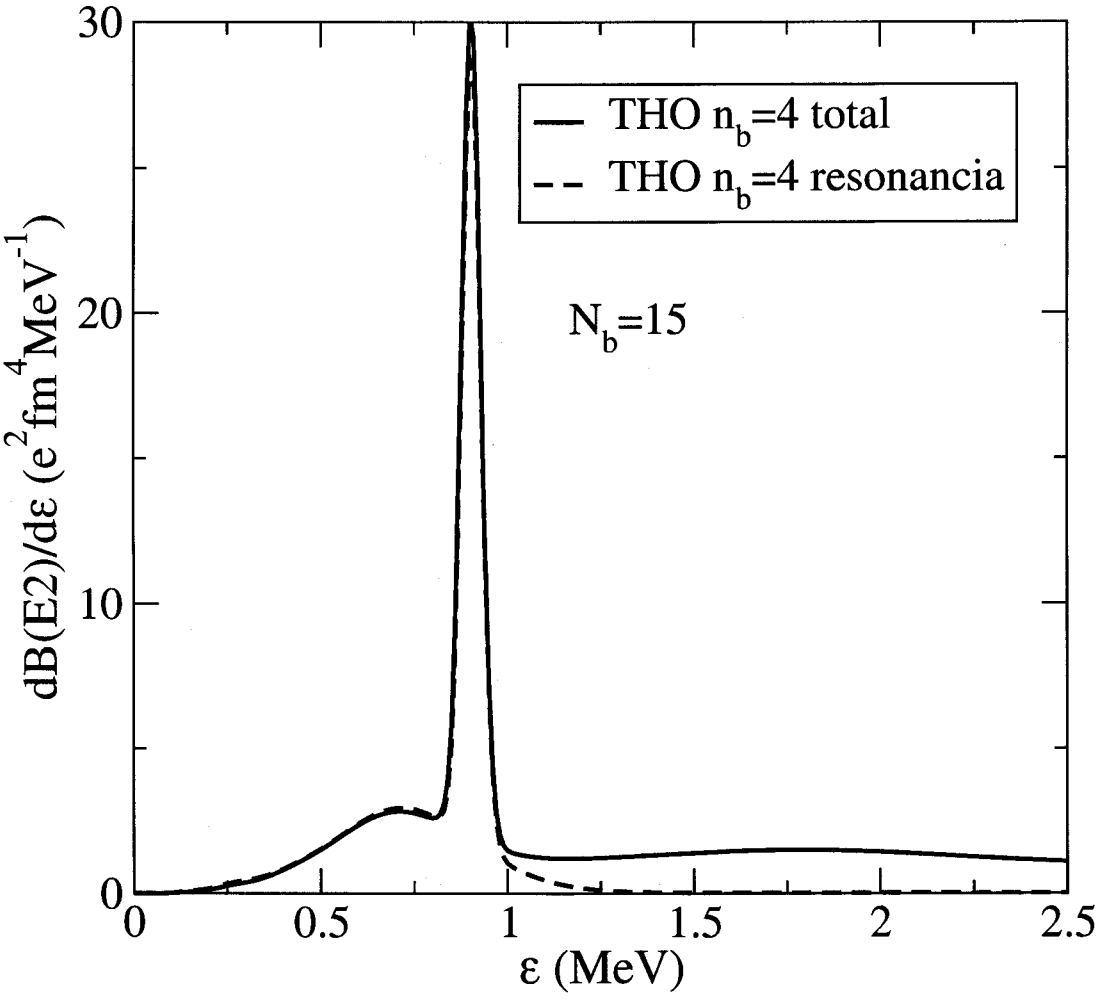


Figura 3.12: *Distribución de $B(E2)$ total para $n_b = 4$ y distribución de $B(E2)$ de la resonancia para $n_b = 4$, usando una distribución de Posisson con $m = 20$ y con $m = 1300$ en torno a la energía de la resonancia.*

Capítulo 4

Reacciones: aplicación a ^{6}He+^{208}Pb

En el capítulo anterior se ha presentado el método del oscilador armónico transformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO) aplicado a un sistema de tres cuerpos y se han realizado cálculos de estructura para estudiar su convergencia en la base THO. En este capítulo se va a hacer uso de la base THO generada de esta forma para realizar cálculos de dispersión. En concreto, se va a estudiar la dispersión del núcleo borromeo ^{6}He por un blanco pesado, ^{208}Pb, como se muestra en la figura 4.1. Los vectores $\vec{r_c}$, $\vec{r_1}$ y $\vec{r_2}$ son las posiciones de cada una de las partículas del proyectil respecto al blanco y vienen dados por las ecuaciones (A.9), (A.10) y (A.11), respectivamente.

Para realizar los cálculos se hará un desarrollo multipolar del potencial de interacción proyectil-blanco. Tras esto, los factores de forma del acoplamiento obtenidos se introducirán en el programa FRESCO [144] para hacer un cálculo de canales acoplados discretizados en el continuo (Continuum Discretized Coupled Channels, CDCC). También se separará la interacción proyectil-blanco en la interacción del blanco con el core $\widehat{V}_{ct}(\vec{r_c})$ y las interacciones del blanco con cada una de las dos partículas de valencia, $\widehat{V}_{1t}(\vec{r_1})$ y $\widehat{V}_{2t}(\vec{r_2})$.

Cálculos de este tipo sólo han sido desarrollados por el grupo japonés de Kamimura et al., con un procedimiento diferente al desarrollo multipolar de la interacción proyectil-blanco tal como se explica en el apartado 1.3 de la introducción. Además lo han aplicado a la dispersión de ^{6}He por el núcleo ^{12}C a 18 y 229,8 MeV considerando sólo la ruptura nuclear [132]. Más recientemente lo han aplicado a la dispersión de ^{6}He por el núcleo ^{209}Bi a 19 y 22,5 MeV, teniendo en cuenta tanto la ruptura nuclear como coulombiana. Estos resultados están

UNIVERSIDAD DE SEVILLA FACULTAD DE FISICA BIBLIOTECA

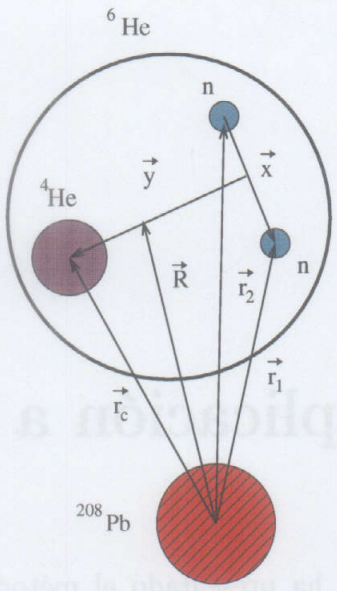


Figura 4.1: *Dispersión del núcleo ^{6}He por el núcleo ^{208}Pb.*

todavía sin publicar.

Con excepción de estos trabajos recientes, los cálculos de reacción que se han realizado hasta la fecha para núcleos borromeos están basados bien en modelos muy simplificados del proyectil, tales como el modelo de dineutrón [152], o bien utilizan aproximaciones más o menos drásticas en el modelo de reacción, como aproximaciones repentinas, semiclásicas, eikonales, etc. [131]. Por el contrario los cálculos que se presentarán en este capítulo están basados en un modelo de tres cuerpos del proyectil y no se hace uso de ninguna de las aproximaciones anteriores para el mecanismo de reacción.

La estructura del capítulo es la siguiente, en el apartado 4.1 se presentará la función de onda del sistema de cuatro cuerpos compuesto por el proyectil de tres cuerpos más el blanco. En el apartado 4.2 se presentará el desarrollo multipolar de los diferentes potenciales de interacción a dos cuerpos proyectil-blanco, eligiendo para cada uno el sistema de Jacobi apropiado. Por último en el apartado 4.3 se aplicará este formalismo a la reacción ^{6}He+^{208}Pb a 22 MeV, incluyendo tanto la interacción coulombiana como la nuclear, y se realizarán cálculos de canales acoplados, obteniéndose las secciones eficaces elástica y de ruptura.

4.1. Función de onda del sistema de cuatro cuerpos

Se va a utilizar como base del proyectil los autoestados obtenidos a partir de la diagonalización de una base THO con un número finito de estados (n_t estados para un valor determinado de j) en el sistema de Jacobi **T**, representado en la figura 3.1. Estos estados vienen dados por la ecuación (3.11), que expresada con la función hiperradial $U(\rho) = \rho^{5/2}R(\rho)$ queda

$$\phi_n^{j\mu}(\vec{x},\vec{y}) = \sum_{\beta i} C_n^{i\beta j} \frac{1}{\rho^{5/2}} U_{i\beta}^{THO}(\rho) \sum_{\nu\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota | j\mu\rangle \kappa_I^\iota \sum_{m\sigma} \langle lm_l S_x\sigma | j_{ab}\nu\rangle \Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega)\chi_{S_x}^\sigma. \tag{4.1}$$

En notación bra-ket, este estado, que está representado por el ket $|nj\mu\rangle$, se puede expresar de la forma siguiente

$$|nj\mu\rangle = \sum_\beta \sum_i C_n^{i\beta j} |THO, i\beta j\mu\rangle, \tag{4.2}$$

donde el ket $|THO, i\beta j\mu\rangle$, que representa el estado THO, se puede expresar como sigue

$$|THO, i\beta j\mu\rangle \equiv |THO, i\beta; \beta j\mu\rangle \equiv |THO, i\beta\rangle \otimes |\beta j\mu\rangle. \tag{4.3}$$

Aquí el ket $|THO, i\beta\rangle$ representa el estado que caracteriza el grado de libertad de la variable hiperradial mientras $|\beta j\mu\rangle$ representa el estado que caracteriza las variables hiperangular, angulares y de espín. Como la variable hiperradial, ρ, es invariante ante el cambio de sistema de Jacobi, si se cambia de sistema de Jacobi se transforma el ket $|\beta j\mu\rangle$. Esta transformación es como sigue[1]

$$|\beta j\mu\rangle = \sum_{\beta_k} N_{\beta\beta_k} |k : \beta_k j\mu\rangle, \tag{4.4}$$

donde los elementos de matriz $N_{\beta\beta_k}$ están relacionados con los coeficientes de Raynal-Revai (A.32) y vienen dados por la ecuaciones (C.12) y (C.13), según la transformación sea en sentido horario o antihorario. Cabe comentar que estas matrices de transformación $N_{\beta\beta_k}$ conservan el momento hiperangular K y el momento angular orbital total l.

[1] Se supone aquí que $|\beta j\mu\rangle \equiv |3 : \beta_3 j\mu\rangle$.

Por su parte la función de onda de cuatro cuerpos se puede desarrollar como

$$\Psi_{JM}(\vec{R},\vec{x},\vec{y}) = \sum_{nj\mu LM_L} \phi_n^{j\mu}(\vec{x},\vec{y})\langle LM_L j\mu|JM\rangle i^L Y_{LM_L}(\widehat{R})\frac{1}{R}f^J_{Lnj}(R), \tag{4.5}$$

donde $\vec{R}$ es la coordenada del proyectil al blanco, L es el momento angular orbital del movimiento relativo proyectil-blanco y J es el momento angular total $\vec{J} = \vec{L}+\vec{j}$. La función radial $f^J_{Lnj}(R)$ satisface un sistema de ecuaciones acopladas que es formalmente igual al de tres cuerpos (1.71),

$$\begin{aligned}&\left[-\frac{\hbar^2}{2m_r}\left(\frac{d^2}{dR^2}-\frac{L(L+1)}{R^2}\right)+\varepsilon_{nj}-E\right]f^J_{Lnj}(R)\\ &+\sum_{L'n'j'} i^{L'-L}V^J_{Lnj,L'n'j'}(R)f^J_{L'n'j'}(R)=0,\end{aligned} \tag{4.6}$$

donde ε_{nj} es la energía del autoestado del proyectil $\phi_n^{j\mu}(\vec{x},\vec{y})$ y m_r es la masa reducida del sistema proyectil-blanco. $V^J_{Lnj,L'n'j'}(R)$ describe el acoplamiento entre los diferentes estados de movimiento relativo

$$V^J_{Lnj,L'n'j'}(R) = \langle LnjJM|\widehat{V}_{1t}(\vec{r_1})+\widehat{V}_{2t}(\vec{r_2})+\widehat{V}_{ct}(\vec{r_c})|L'n'j'JM\rangle, \tag{4.7}$$

donde el ket $|LnjJM\rangle$ denota la función $\Phi^{JM}_{Lnj}(\widehat{R},\vec{x},\vec{y})$ que viene dada por

$$\Phi^{JM}_{Lnj}(\widehat{R},\vec{x},\vec{y}) = \sum_{\mu M_L}\phi_n^{j\mu}(\vec{x},\vec{y})\langle LM_L j\mu|JM\rangle Y_{LM_L}(\widehat{R}). \tag{4.8}$$

Este ket se puede expresar entonces de la forma siguiente

$$|LnjJM\rangle \equiv \sum_{\mu M_L}\langle LM_L j\mu|JM\rangle|nj\mu;LM_L\rangle, \tag{4.9}$$

es decir, como producto directo del ket $|nj\mu\rangle$ que representa el estado interno del proyectil y el ket $|LM_L\rangle$ que representa el estado que caracteriza los grados de libertad de la variables angulares del movimiento relativo entre el proyectil y el blanco.

4.2. Desarrollo multipolar del potencial

Para calcular los potenciales de acoplamiento (4.7) se va a realizar un desarrollo multipolar de la interacción proyectil-blanco. Como esta interacción se

separa en la interacción de cada una de las partículas del proyectil con el blanco, se va a elegir para cada potencial, $\widehat{V}_{1t}(\vec{r_1})$, $\widehat{V}_{2t}(\vec{r_2})$ y $\widehat{V}_{ct}(\vec{r_c})$, el sistema de Jacobi en el cual el correspondiente vector $\vec{r}$ dependa sólo de $\vec{R}$ e $\vec{y}$. Suponiendo que los potenciales son centrales, los coeficientes del desarrollo multipolar para cada potencial se pueden construir como

$$\mathcal{V}_Q^k(R, y_k) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{+1} \widehat{V}^k(r_k) P_Q(z_k) dz_k, \tag{4.10}$$

donde

$$\widehat{V}^1(r_1) = \widehat{V}_{1t}(r_1), \tag{4.11}$$

$$\widehat{V}^2(r_2) = \widehat{V}_{2t}(r_2), \tag{4.12}$$

$$\widehat{V}^3(r_3) = \widehat{V}_{ct}(r_c), \tag{4.13}$$

$P_Q(z_k)$ es un polinomio de Legendre, Q es el multipolo y $z_k = \widehat{y}_k \cdot \widehat{R}$ es el coseno del ángulo entre $\vec{y}_k$ y $\vec{R}$. Así que como un desarrollo multipolar, el potencial de acoplamiento $V^J_{Lnj,L'n'j'}(R)$ se puede escribir como

$$V^J_{Lnj,L'n'j'}(R) = \sum_Q (-1)^{J-j} \hat{L}\hat{L}' \begin{pmatrix} L & Q & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} W(LL'jj', QJ) F^Q_{nj,n'j'}(R), \tag{4.14}$$

donde el factor de forma $F^Q_{nj,n'j'}(R)$ es

$$\begin{aligned} F^Q_{nj,n'j'}(R) &= (-1)^{Q+2j-j'} \hat{j}\hat{j}'(2Q+1) \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \sum_{k=1}^{3} \sum_{\beta_k \beta'_k} N_{\beta\beta_k} N_{\beta'\beta'_k} \\ &\times (-1)^{l_{xk}+S_{xk}+j'_{abk}-j_{abk}-I_k} \delta_{l_{xk}l'_{xk}} \delta_{S_{xk}S'_{xk}} \hat{l}_{yk}\hat{l}'_{yk}\hat{l}_k\hat{l}'_k\hat{j}_{abk}\hat{j}'_{abk} \begin{pmatrix} l_{yk} & Q & l'_{yk} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\times W(l_k l'_k l_{yk} l'_{yk}; Q l_{xk}) W(j_{abk} j'_{abk} l_k l'_k; Q S_{xk}) W(jj' j_{abk} j'_{abk}; Q I_k) \\ &\times \int\int (\text{sen}\,\alpha_k)^2 (\cos\alpha_k)^2 d\alpha_k \, d\rho \; U^{THO}_{i\beta}(\rho) \varphi^{l_{xk}l_{yk}}_{K_k}(\alpha_k) \mathcal{V}^k_Q(R, y_k) \varphi^{l_{xk}l'_{yk}}_{K'_k}(\alpha_k) U^{THO}_{i'\beta'}(\rho). \end{aligned} \tag{4.15}$$

Las ecuaciones (4.14) y (4.15) son el resultado final del desarrollo multipolar del potencial. Para llegar a estas expresiones se realiza el proceso tedioso que se explica a continuación partiendo de los coeficientes del desarrollo multipolar.

Para cada potencial de interacción central, en el sistema de Jacobi correspondiente, se tiene el desarrollo multipolar

$$\widehat{V}^k(r_k) = \sum_Q (2Q+1)\mathcal{V}_Q^k(R, y_k)P_Q(z_k). \tag{4.16}$$

Así, sustituyendo esta ecuación (4.16) en la ecuación (4.7) se tiene

$$V^J_{Lnj,L'n'j'}(R) = \sum_Q (2Q+1)\langle LnjJM|\sum_{k=1}^{3}\mathcal{V}_Q^k(R, y_k)P_Q(z_k)|L'n'j'JM\rangle. \tag{4.17}$$

Considerando $\langle LnjJM|\mathcal{V}_Q^k(R, y_k)P_Q(z_k)|L'n'j'JM\rangle$ e introduciendo (4.9) se tiene

$$\langle LnjJM|\mathcal{V}_Q(R, y_k)P_Q(z_k)|L'n'j'JM\rangle = \sum_{M_L M'_L \mu\mu'} \langle LM_L j\mu|JM\rangle\langle L'M'_L j'\mu'|JM\rangle \times \langle nj\mu; LM_L|\mathcal{V}_Q^k(R, y_k)P_Q(z_k)|n'j'\mu'; L'M'_L\rangle. \tag{4.18}$$

Sabiendo que

$$P_Q(z) = P_Q\left[\cos(\widehat{y}\cdot\widehat{R})\right] = \frac{4\pi}{2Q+1}\sum_q Y_{Qq}(\widehat{y})Y_{Qq}(\widehat{R})^* \tag{4.19}$$

y teniendo en cuenta la expresión (B.5), se tiene

$$\langle LnjJM|\mathcal{V}_Q(R, y_k)P_Q(z_k)|L'n'j'JM\rangle = \sum_{M_L M'_L \mu\mu'} \langle LM_L j\mu|JM\rangle\langle L'M'_L j'\mu'|JM\rangle \times \frac{4\pi}{2Q+1}\sum_q (-1)^q\langle nj\mu|\mathcal{V}_Q^k(R, y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|n'j'\mu'\rangle\langle LM_L|Y_{Q-q}(\widehat{R})|L'M'_L\rangle. \tag{4.20}$$

Considerando la expresiones (B.5) y (B.6) se tiene para $\langle LM_L|Y_{Q-q}(\widehat{R})|L'M'_L\rangle$

$$\begin{aligned}\langle LM_L|Y_{Q-q}(\widehat{R})|L'M'_L\rangle &= (-1)^{M_L}\int d\widehat{R}\, Y_{L-M_L}(\widehat{R})Y_{Q-q}(\widehat{R})Y_{L'M'_L}(\widehat{R}) \\ &= (-1)^{M_L}\frac{\hat{L}\hat{Q}\hat{L}'}{\sqrt{4\pi}}\begin{pmatrix} L & Q & L' \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} L & Q & L' \\ -M_L & -q & M'_L\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{4.21}$$

Por otra parte, para $\langle njm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|n'j'm'\rangle$, introduciendo el desarrollo (4.2) se tiene

$$\begin{aligned}
&\langle njm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|n'j'm'\rangle \\
&= \sum_{\beta\beta'}\sum_{ii'} C_n^{i\beta j}C_{n'}^{i'\beta'j'}\langle THO, i\beta jm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|THO, i'\beta'j'm'\rangle \\
&= \sum_{\beta\beta'}\sum_{ii'} C_n^{i\beta j}C_{n'}^{i'\beta'j'}\langle THO, i\beta;\beta jm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|THO, i'\beta';\beta j'm'\rangle.
\end{aligned} \tag{4.22}$$

Usando la transformación (4.4) se puede expresar todo en el mismo sistema de Jacobi

$$\begin{aligned}
\langle njm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|n'j'm'\rangle &= \sum_{\beta\beta'}\sum_{ii'} C_n^{i\beta j}C_{n'}^{i'\beta'j'}\sum_{\beta_k\beta'_k} N_{\beta\beta_k}N_{\beta'\beta'_k} \\
\times\langle THO, i\beta;k:\beta_k jm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|THO, i'\beta';k:\beta_k j'm'\rangle.&
\end{aligned} \tag{4.23}$$

Teniendo que el ket $|THO, i\beta jm\rangle$ denota la función de onda (3.9) y que el operador es independiente de las variables de espín, se tiene

$$\begin{aligned}
\langle njm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|n'j'm'\rangle &= \sum_{\beta\beta'ii'} C_n^{i\beta j}C_{n'}^{i'\beta'j'}\sum_{\beta_k\beta'_k} N_{\beta\beta_k}N_{\beta'\beta'_k} \\
\times\sum_{\nu_k\nu'_k\iota_k\iota'_k}&\langle j_{abk}\nu_k I_k\iota_k|jm\rangle\langle j'_{abk}\nu'_k I_k\iota'_k|j'm'\rangle\delta_{\iota_k\iota'_k} \\
\times\sum_{m_{lk}m'_{lk}\sigma_k\sigma'_k}&\langle l_k m_{lk}S_{xk}\sigma_k|j_{abk}\nu_k\rangle\langle l'_k m'_{lk}S'_{xk}\sigma'_k|j'_{abk}\nu'_k\rangle\delta_{S_{xk}S'_{xk}}\delta_{\sigma_k\sigma'_k} \\
\times\int\int d\Omega_k\, d\rho\, &\Upsilon_{K_k l_k m_{lk}}^{l_{xk}l_{yk}}(\Omega_k)^* U_{i\beta}^{THO}(\rho)\mathcal{V}_Q(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho)\Upsilon_{K'_k l'_k m'_{lk}}^{l'_{xk}l'_{yk}}(\Omega_k).
\end{aligned} \tag{4.24}$$

Ahora usando las ecuaciones (A.26) y (A.30) se tiene

$$\begin{aligned}
\langle njm|\mathcal{V}_Q^k(R,y_k)Y_{Qq}(\widehat{y}_k)|n'j'm'\rangle &= \sum_{\beta\beta'ii'} C_n^{i\beta j}C_{n'}^{i'\beta'j'}\sum_{\beta_k\beta'_k} N_{\beta\beta_k}N_{\beta'\beta'_k}\delta_{S_{xk}S'_{xk}} \\
\times\int\int(\operatorname{sen}\alpha_k)^2(\cos\alpha_k)^2 d\alpha_k\, d\rho\, &U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_{K_k}^{l_{xk}l_{yk}}(\alpha_k)\mathcal{V}_Q(R,y_k)\varphi_{K'_k}^{l'_{xk}l'_{yk}}(\alpha_k)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\
\times\sum_{\nu_k\nu'_k\iota_k}&\langle j_{abk}\nu_k I_k\iota_k|jm\rangle\langle j'_{abk}\nu'_k I_k\iota_k|j'm'\rangle\sum_{m_{lk}m'_{lk}\sigma_k}\langle l_k m_{lk}S_{xk}\sigma_k|j_{abk}\nu_k\rangle\langle l'_k m'_{lk}S_{xk}\sigma_k|j'_{abk}\nu'_k\rangle \\
\times\sum_{m_{xk}m'_{xk}}\sum_{m_{yk}m'_{yk}}&\langle l_{xk}m_{xk}l_{yk}m_{yk}|l_k m_{lk}\rangle\langle l'_{xk}m'_{xk}l'_{yk}m'_{yk}|l'_k m'_{lk}\rangle \\
\times\int d\widehat{x}_k Y_{l_{xk}m_{xk}}(\widehat{x}_k)^* Y_{l'_{xk}m'_{xk}}(\widehat{x}_k)&\int d\widehat{y}_k Y_{l_{yk}m_{yk}}(\widehat{y}_k)^* Y_{Qq}(\widehat{y}_k)Y_{l'_{yk}m'_{yk}}(\widehat{y}_k).
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Ahora, por un lado,

$$\int d\widehat{x}_k Y_{l_{xk}m_{xk}}(\widehat{x}_k)^* Y_{l'_{xk}m'_{xk}}(\widehat{x}_k) = \delta_{l_{xk}l'_{xk}}\delta_{m_{xk}m'_{xk}} \tag{4.26}$$

y, por el otro, usando de nuevo la relaciones (B.5) y (B.6)

$$\int d\widehat{y}_k Y_{l_{yk}m_{yk}}(\widehat{y}_k)^* Y_{Qq}(\widehat{y}_k) Y_{l'_{yk}m'_{yk}}(\widehat{y}_k) = (-1)^{m_{yk}} \frac{\hat{l_{yk}}\hat{Q}\hat{l'_{yk}}}{\sqrt{4\pi}} \times \begin{pmatrix} l_{yk} & Q & l'_{yk} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{yk} & Q & l'_{yk} \\ -m_{yk} & q & m'_{yk} \end{pmatrix}. \tag{4.27}$$

Los Clebsch-Gordan de la expresiones (4.20) y (4.25) se pueden transformar en símbolos 3-j según la expresión (B.9) y junto a los de la expresiones (4.21) y (4.27), se tiene[2]

$$\begin{aligned}
&\sum_{M_L M'_L \mu\mu'} \sum_{\nu\nu'\iota} \sum_{m_l m'_l \sigma} \sum_{m_y m'_y m_x} \sum_{q} \langle LM_L j\mu | JM\rangle \langle L'M'_L j'\mu' | JM\rangle \langle j_{ab}\nu I\iota | j\mu\rangle \langle j'_{ab}\nu' I\iota | j'\mu'\rangle \\
&\times \langle lm_l S_x\sigma | j_{ab}\nu\rangle \langle l'm'_l S_x\sigma | j'_{ab}\nu'\rangle \langle l_x m_x l_y m_y | lm_l\rangle \langle l_x m_x l'_y m'_y | l'm'_l\rangle \\
&\times (-1)^{M_L+m_y+q} \begin{pmatrix} L & Q & L' \\ -M_L & -q & M'_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & Q & l'_y \\ -m_y & q & m'_y \end{pmatrix} \\
&= \sum_{M_L M'_L \mu\mu'} \sum_{\nu\nu'\iota} \sum_{m_l m'_l \sigma} \sum_{m_y m'_y m_x} \sum_{q} \hat{J}^2 \hat{j}\hat{j}'\hat{j}_{ab}\hat{j}'_{ab}\hat{l}\hat{l}'(-1)^{L+L'-j-j'+j_{ab}+j'_{ab}-2I+l+l'-2S_x+l_y+l'_y} \\
&\times (-1)^{2M+\mu+\mu'+\nu+\nu+m_l+m'_l+M_L+m_y+q} \begin{pmatrix} L & j & J \\ M_L & \mu & -M \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L' & j' & J \\ M'_L & \mu' & -M \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} j_{ab} & I & j \\ \nu & \iota & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_{ab} & I & j' \\ \nu' & \iota & -\mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & S_x & j_{ab} \\ m_l & \sigma & -\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & S_x & j'_{ab} \\ m'_l & \sigma & -\nu' \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} l_x & l_y & l \\ m_x & m_y & -m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_x & l'_y & l' \\ m_x & m'_y & -m' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & Q & L' \\ -M_L & -q & M'_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & Q & l'_y \\ -m_y & q & m'_y \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.28}$$

[2]Por simplicidad no se va a especificar k

Conociendo la relación (B.11) se tiene

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_x m_y m'_y} (-1)^{m_y} \begin{pmatrix} l_x & l_y & l \\ m_x & m_y & -m_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & Q & l'_y \\ -m_y & q & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_x & l'_y & l' \\ m_x & m'_y & -m'_l \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+l'_y+m'_l} \sum_{m_x m_y m'_y} (-1)^{l-l'_y+m'_l-m_y} \begin{pmatrix} l_x & l_y & l \\ m_x & m_y & -m_l \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} l_y & Q & l'_y \\ m_y & -q & -m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & l_x & l'_y \\ -m'_l & m_x & m'_y \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+l'_y+m'_l} W(l' l_x Q l_y; l'_y l) \begin{pmatrix} Q & l' & l \\ -q & -m'_l & m_l \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{Q+l_x+m'_l} W(l l' l_y l'_y; Q l_x) \begin{pmatrix} Q & l' & l \\ -q & -m'_l & m_l \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Ahora con este $(-1)^{m'_l}$ se va el mismo término de la expresión (4.28) y con este 3-j y aplicando otra vez (B.11)

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_l m'_l \sigma} (-1)^{m_l} \begin{pmatrix} l & S_x & j_{ab} \\ m_l & \sigma & -\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Q & l' & l \\ -q & -m'_l & m_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & S_x & j'_{ab} \\ m'_l & \sigma & -\nu' \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+j'_{ab}+2S_x-\nu'} \sum_{m_l m'_l \sigma} (-1)^{j_{ab}-l'+\nu'-m_l} \begin{pmatrix} S_x & l & j_{ab} \\ \sigma & m_l & -\nu \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} l & Q & l' \\ m_l & -q & -m'_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_{ab} & S_x & l' \\ -\nu' & \sigma & m'_l \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+j'_{ab}+2S_x-\nu'} W(j'_{ab} S_x Q l; l' j_{ab}) \begin{pmatrix} Q & j'_{ab} & j_{ab} \\ -q & -\nu' & \nu \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{Q+3S_x+l+l'-j_{ab}+j'_{ab}-\nu'} W(j_{ab} j'_{ab} l l'; Q S_x) \begin{pmatrix} Q & j'_{ab} & j_{ab} \\ -q & -\nu' & \nu \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.30}$$

Otra vez con $(-1)^{-\nu'}$ se va el término $(-1)^{\nu'}$ de la expresión (4.28) y con este 3-j

y aplicando (B.11)

$$\begin{aligned}
&\sum_{\nu\nu'\iota}(-1)^{\nu}\begin{pmatrix} j_{ab} & I & j \\ \nu & \iota & -\mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Q & j'_{ab} & j_{ab} \\ -q & -\nu' & \nu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j'_{ab} & I & j' \\ \nu' & \iota & -\mu' \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{Q+j+2j'+3j_{ab}+\mu'}\sum_{\nu\nu'\iota}(-1)^{j-j'_{ab}-\mu'+\nu}\begin{pmatrix} I & j_{ab} & j \\ -\iota & -\nu & \mu \end{pmatrix} \\
&\times\begin{pmatrix} j_{ab} & Q & j'_{ab} \\ -\nu & q & \nu' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j' & I & j'_{ab} \\ \mu' & -\iota & -\nu' \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{Q+j+2j'+3j_{ab}+\mu'}W(j'IQj_{ab};j'_{ab}j)\begin{pmatrix} Q & j' & j \\ q & \mu' & -\mu \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{I+2j'+3j_{ab}-j'_{ab}+\mu'}W(jj'j_{ab}j'_{ab};QI)\begin{pmatrix} Q & j' & j \\ q & \mu' & -\mu \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.31}$$

De nuevo con $(-1)^{2j'+\mu'}$ se va el término $(-1)^{\mu'}$ de la expresión (4.28). Ahora, otra vez con este 3-j, la relación

$$\begin{aligned}
W(abcd;ef) = &\sum_{\alpha\beta\epsilon\delta\phi}(2c+1)(-1)^{f-e-\alpha-\delta}\begin{pmatrix} a & b & e \\ \alpha & \beta & -\epsilon \end{pmatrix}\begin{pmatrix} d & c & e \\ \delta & \gamma & \epsilon \end{pmatrix} \\
&\times\begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} c & a & f \\ \gamma & \alpha & \phi \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{4.32}$$

y cambiando $(-1)^{M_L+q+\mu} = (-1)^{M_L-\mu'+2M}$ (ya que $(-1)^{q+\mu} = (-1)^{q-M_L+M} = (-1)^{M'_L+M} = (-1)^{2M-\mu'}$) se tiene que el término $(-1)^{2M}$ de la expresión (4.28) se va con éste y

$$\begin{aligned}
&\sum_{M_L M'_L\mu\mu' q}(-1)^{M_L-\mu'}\begin{pmatrix} L & j & J \\ M_L & \mu & -M \end{pmatrix}\begin{pmatrix} L & Q & L' \\ -M_L & -q & M'_L \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Q & j' & j \\ q & \mu' & -\mu \end{pmatrix} \\
&\times\begin{pmatrix} L' & j' & J \\ M'_L & \mu' & -M \end{pmatrix} = \frac{1}{2J+1}(-1)^{L'-j}\sum_{M_l M'_l\mu\mu' q}(2J+1)(-1)^{j-L'-M_L-\mu'} \\
&\times\begin{pmatrix} J & L & j \\ -M & M_L & \mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} L & Q & L' \\ M_L & q & -M'_L \end{pmatrix}\begin{pmatrix} Q & j' & j \\ q & \mu' & -\mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j' & J & L' \\ \mu' & -M & M'_L \end{pmatrix} \\
&= \frac{1}{2J+1}(-1)^{L'-j}W(LQJj';L'j) = \frac{1}{2J+1}(-1)^{J+Q-2j}W(jj'LL';QJ).
\end{aligned} \tag{4.33}$$

Ahora reuniéndolo todo y reordenando se llega a

$$V^J_{Lnj,L'n'j'}(R) = \sum_Q (2Q+1) \sum_{\beta\beta' ii'} C^{i\beta j}_n C^{i'\beta' j'}_{n'}$$
$$\times \sum_{k=1}^{3} \sum_{\beta_k \beta'_k} N_{\beta\beta_k} N_{\beta'\beta'_k} \delta_{l_{xk} l'_{xk}} \delta_{S_{xk} S'_{xk}} (-1)^{J+Q+j-j'-j_{abk}+j'_{abk}+S_{xk}-I_k+l_{xk}}$$
$$\times \int\int (\mathrm{sen}\,\alpha_k)^2 (\cos\alpha_k)^2 d\alpha_k \; d\rho \; U^{THO}_{i\beta}(\rho) \varphi^{l_{xk} l_{yk}}_{K_k}(\alpha_k) \mathcal{V}^k_Q(R, y_k) \varphi^{l_{xk} l'_{yk}}_{K'_k}(\alpha_k) U^{THO}_{i'\beta'}(\rho)$$
$$\times \begin{pmatrix} L & Q & L' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_{yk} & Q & l'_{yk} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \hat{L}\hat{L}'\hat{j}\hat{j}'\hat{l}_k\hat{l}'_k\hat{l}_{yk}\hat{l}'_{yk}\hat{j}_{abk}\hat{j}'_{abk}$$
$$\times W(l_k l'_k l_{yk} l'_{yk}; Q l_{xk}) W(j_{abk} j'_{abk} l_k l'_k; Q S_{xk}) W(jj' j_{abk} j'_{abk}; Q I_k) W(LL' jj', QJ). \tag{4.34}$$

Si se extrae la dependencia en J y L y siguiendo la nomenclatura de Bohr y Mottelson Vol. I sección 1A-5c [31], se puede expresar $V^J_{Lnj,L'n'j'}(R)$ como (4.14) que es la ecuación final.

En este apartado se ha presentado el desarrollo multipolar del potencial de interacción proyectil-blanco. Eligiendo para el potencial de interacción de cada partícula del proyectil con el blanco el sistema de Jacobi apropiado se llega a una expresión cerrada dada por las ecuaciones (4.14) y (4.15).

4.3. Reacción ^{6}He+^{208}Pb

Como aplicación del formalismo explicado en los apartados anteriores se va a considerar la reacción ^{6}He+^{208}Pb a 22 MeV, incluyendo tanto la interacción coulombiana como la nuclear. En el caso de la interacción nuclear, se han tomado potenciales ópticos, que son potenciales efectivos cuya parte imaginaria reduce el flujo del canal elástico para tener en cuenta canales que no se pueden considerar explícitamente en el esquema CDCC como la transferencia, la excitación del blanco, etc. Estos potenciales ópticos tienen tienen la forma

$$V_N(r) = U(r) + iW(r), \tag{4.35}$$

donde $U(r)$ es un potencial de volumen reproducido por un potencial de Woods-Saxon,

$$U(r) = -\frac{U_0}{1 + \exp\left[\frac{r-r_0}{a_0}\right]}, \tag{4.36}$$

y $W(r)$ es un potencial de superficie reproducido por la derivada de un potencial de Woods-Saxon,

$$W(r) = -4W_i \frac{\exp\left[\frac{r-r_i}{a_i}\right]}{\left[1+\exp\left[\frac{r-r_i}{a_i}\right]\right]^2}. \tag{4.37}$$

Para este trabajo el potencial α+^{208}Pb se ha tomado de la referencia [145] y el potencial n+^{208}Pb de la referencia [146] y tienen los valores siguientes:

	U_0(MeV)	r_0(fm)	a_0(fm)	W_i(MeV)	r_i(fm)	a_i(fm)
α+^{208}Pb	96,44	8,153	0,625	32	7,205	0,420
n+^{208}Pb	47,37	7,240	0,726	6,24	7,714	0,351

Para la interacción de Coulomb, que sólo tiene lugar entre el core y el blanco, se ha utilizado un potencial de Coulomb de esfera dura para r menor que el r_0 de la interacción nuclear α+^{208}Pb y una interacción de Coulomb puntual para r mayor que este r_0, es decir,

$$V_C(r) = \begin{cases} \frac{zZe^2}{2r_0}\left(3-\frac{r^2}{r_0^2}\right) & r < r_0 \\ \frac{zZe^2}{r} & r > r_0 \end{cases} \tag{4.38}$$

donde z es el número atómico de ^{6}He y Z el de ^{208}Pb.

Los coeficientes del desarrollo multipolar (4.10) se calculan con una cuadratura de Legendre de orden $n_{leg} = 32$. Por su parte, las integrales en ρ y α de la expresión del factor de forma (4.15) se hacen con la cuadratura de Laguerre de orden $n_{lag} = 60$, explicada en el apartado 3.2.4, y de Gauss-Jacobi de orden $n_{jac} = 50$, respectivamente. Para estos órdenes de cuadratura se ha comprobado que los resultados ya han convergido.

Como estados del proyectil se utilizan los autoestados obtenidos con la base THO generada con la función de onda del estado fundamental de ^{6}He con $K_{max} = 8$, obtenida con los potenciales dados en el apartado 3.2. Esta descripción con $K_{max} = 8$ se justifica ya que, según los datos mostrados en el mismo apartado, la contribución a la norma del estado fundamental con $K_{max} = 20$ de los canales hasta $K = 8$ es del 99 %. Se van a presentar los resultados para una base THO con $n_b = 2$ excitaciones hiperradiales que es una base que describe los aspectos globales del acoplamiento al continuo, como muestran los cálculos de las funciones de intensidad de ρ^2, $B(E1)$ y $B(E2)$ presentados en el apartado 3.3. No obstante, se está trabajando para aumentar K_{max} y n_b con objeto de estudiar la convergencia de los resultados.

4.3.1. Factores de forma

Antes de mostrar los resultados del cálculo CDCC, resulta interesante mostrar algunos de los factores de forma $F^{Q}_{nj,n'j'}(R)$, tanto su parte real como imaginaria. En la figuras 4.2 - 4.13 se muestran distintos ejemplos, donde $n = 1, j^{\pi} = 0^{+}$ es el estado fundamental del sistema. Se puede observar cómo, en general, presentan formas suaves.

En particular, se puede ver cómo en el caso de los factores de forma monopolares diagonales, figuras 4.2 - 4.5, la forma de la parte real recuerda al potencial de Woods-Saxon y la parte imaginaria a la derivada del potencial de Woods-Saxon. También se puede ver cómo la extensión de dichas formas es mayor para los estados del continuo no resonante, figuras 4.3 y 4.4. Por otra parte, a distancias grandes las partes reales se comportan como el potencial coulombiano decayendo a cero como R^{-1}. Por su parte, el factor de forma monopolar de excitación de la figura 4.6 presenta una forma diferente y la parte real no tiene tampoco el comportamiento coulombiano a largas distancias sino que decae rápidamente a cero.

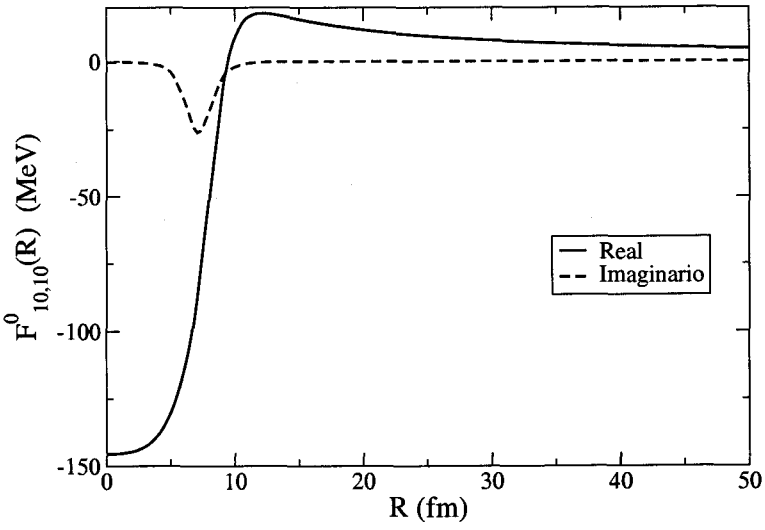


Figura 4.2: *Factor de forma monopolar diagonal para el estado fundamental* 0^{+}_{1}.

Las partes reales de los factores de forma dipolares, figuras 4.7 - 4.9, tienden a cero como R para $R \to 0$, mientras para $R \to \infty$ van como R^{-2}, es decir, como el factor de forma dipolar coulombiano. Además muestran una interferencia nuclear-

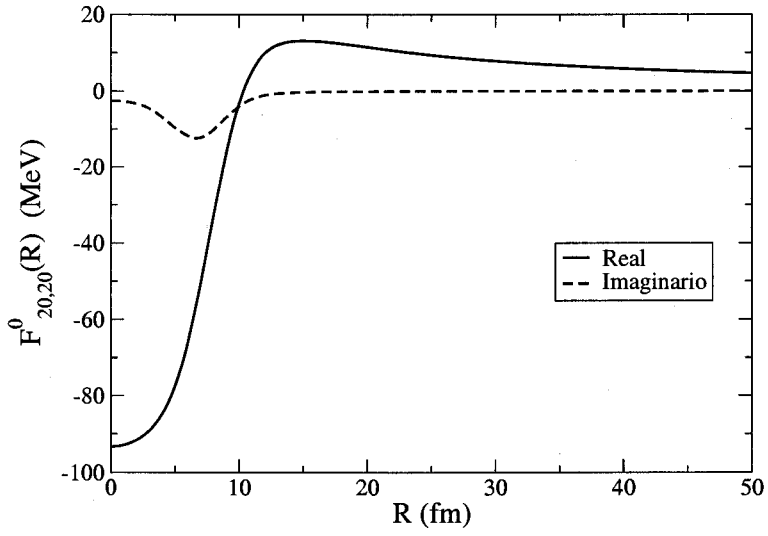


Figura 4.3: *Factor de forma monopolar diagonal para el estado excitado* 0_2^+.

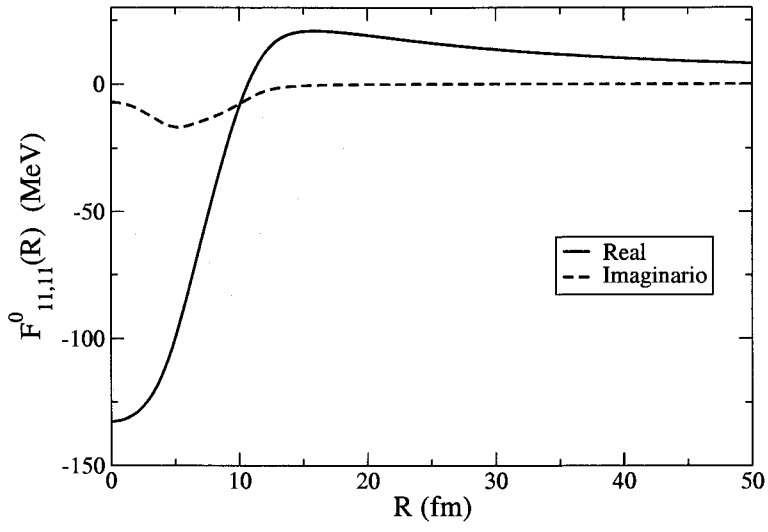


Figura 4.4: *Factor de forma monopolar diagonal para el estado* 1_1^-.

coulombiana destructiva en torno a $R = 10$ fm.

Finalmente, las partes reales de los factores de forma cuadrupolares, figuras 4.10 - 4.13, tienden a cero como R^2 para $R \to 0$, mientras para $R \to \infty$ van como R^{-3}, es decir, como el factor de forma cuadrupolar coulombiano. Además muestran una interferencia nuclear-coulombiana constructiva en torno a $R = 10$ fm.

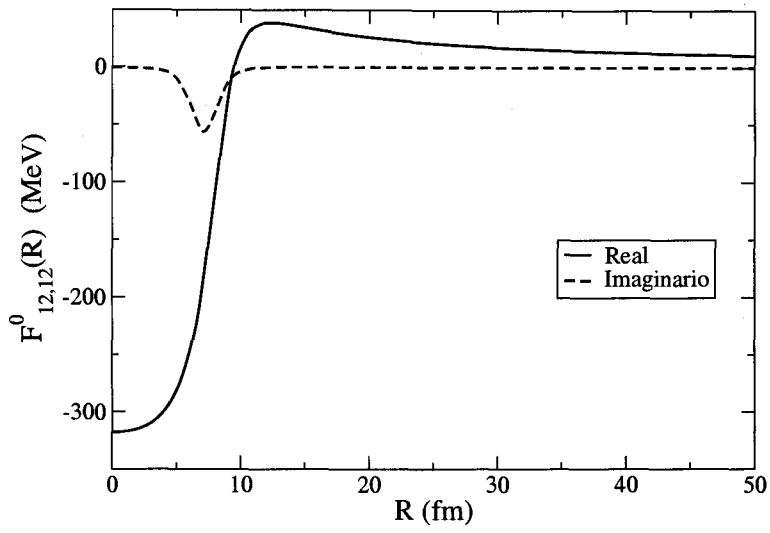


Figura 4.5: *Factor de forma monopolar diagonal para el estado de la resonancia* 2^+.

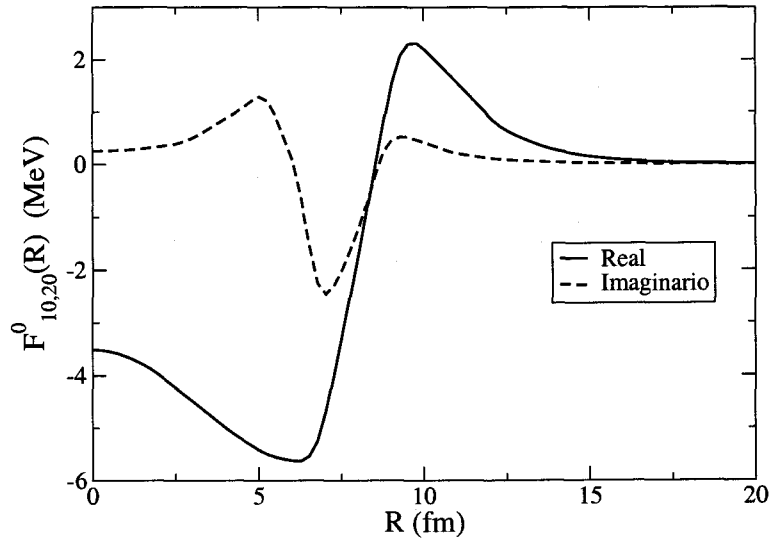


Figura 4.6: *Factor de forma monopolar para la excitación del estado* 0^+_1 *al* 0^+_2.

4.3.2. Cálculo de canales acoplados

Una vez calculados los factores de forma $F^Q_{nj,n'j'}(R)$ para los estados $j^\pi = 0^+, 1^-, 2^+$, los multipolos $Q = 0, 1, 2$ y los autoestados con $\varepsilon_{nj} \leq 10$ MeV, se procede a la resolución de las ecuaciones acopladas (4.6) con el programa FRESCO que lee externamente dichos factores de forma. El hecho de considerar sólo los

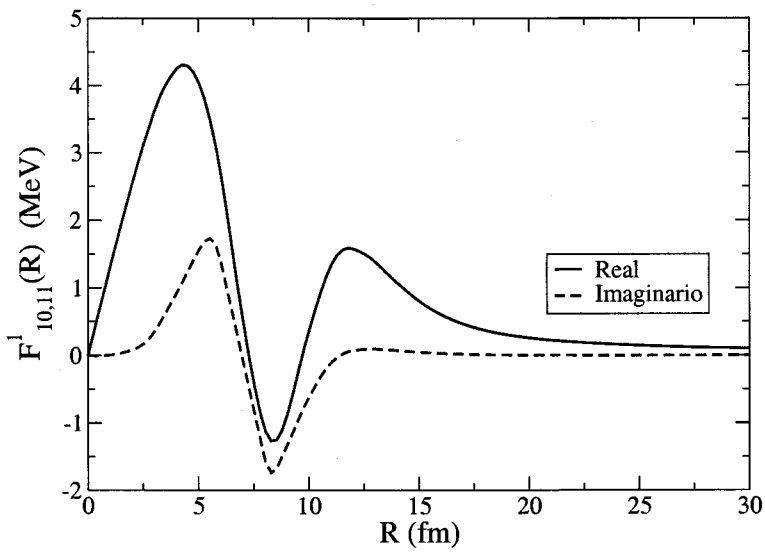


Figura 4.7: *Factor de forma dipolar para la excitación del estado* 0^+_1 *al* 1^-_1.

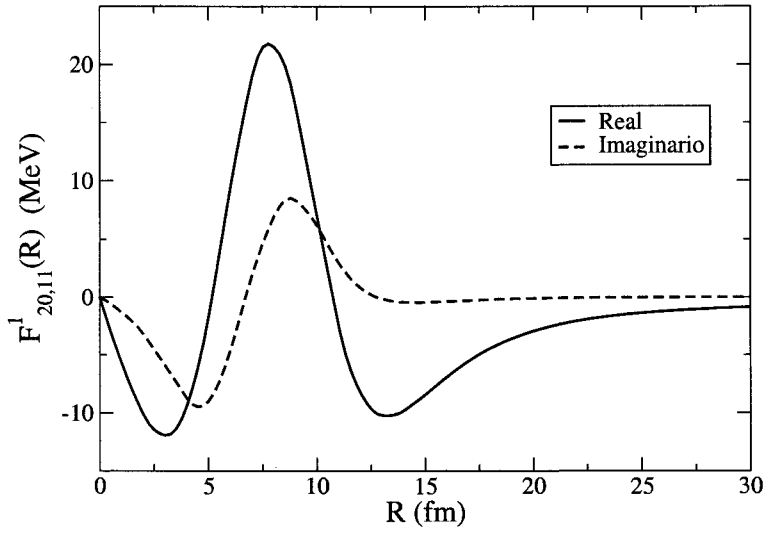


Figura 4.8: *Factor de forma dipolar para la excitación del estado* 0^+_2 *al* 1^-_1.

estados por debajo de 10 MeV se puede justificar en base a varios argumentos. Por un lado, las distribuciones de $B(E1)$ y $B(E2)$ presentadas en el apartado 3.3 muestran que los estados con energías por encima de este valor no están fuertemente acoplados al estado fundamental a través de la interacción coulombiana. Además, se han realizado algunas pruebas eliminando los últimos estados y se

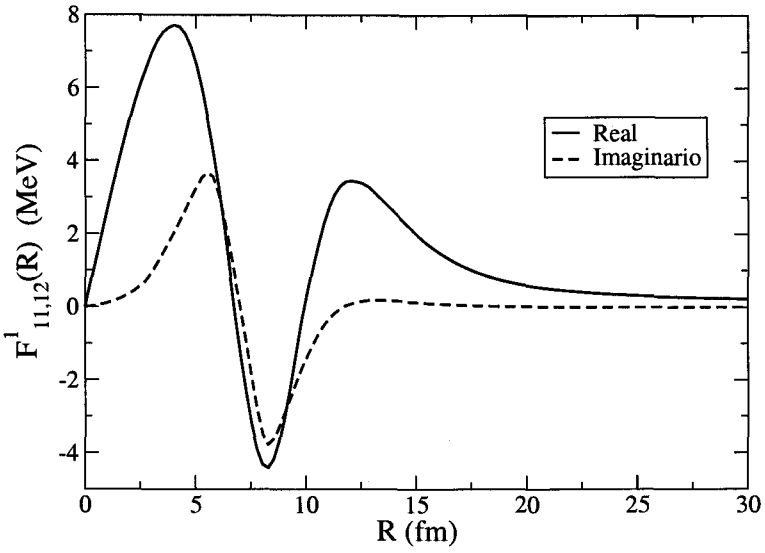


Figura 4.9: *Factor de forma dipolar para la excitación del estado* 1^-_1 *al* 2^+_1.

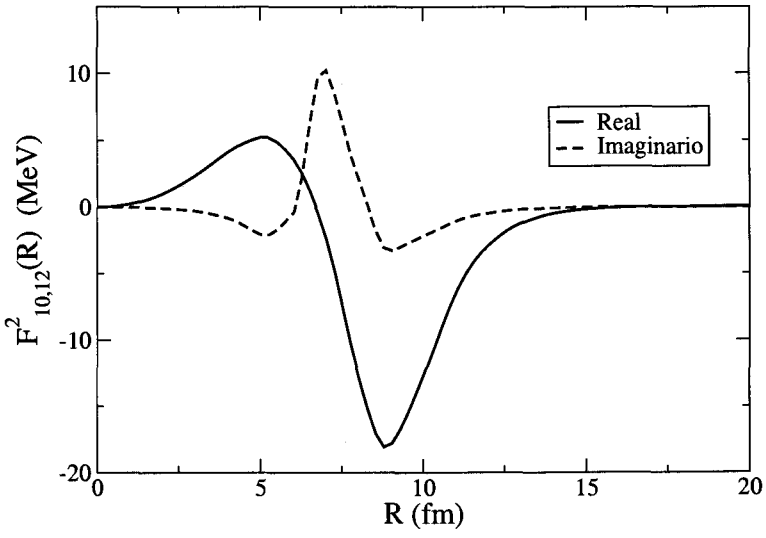


Figura 4.10: *Factor de forma cuadrupolar para la excitación del estado* 0^+_1 *al* 2^+_1.

ha obtenido que éstos contribuyen poco a la ruptura total. Finalmente, como se mostrará más adelante en la figura 4.18, los estados con energía superior a 5 MeV se pueblan débilmente en esta reacción.

Para la realización de estos cálculos el programa FRESCO utiliza una serie de parámetros que tienen que ser fijados:

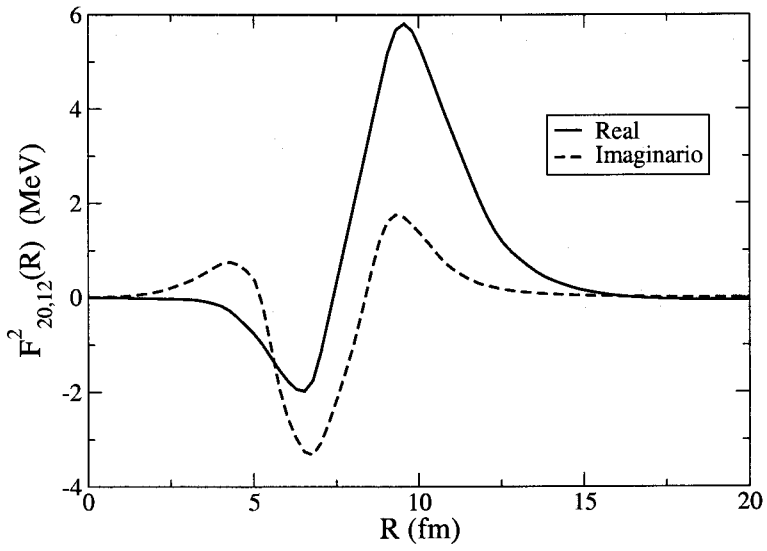


Figura 4.11: *Factor de forma cuadrupolar para la excitación del estado* 0_2^+ *al* 2_1^+.

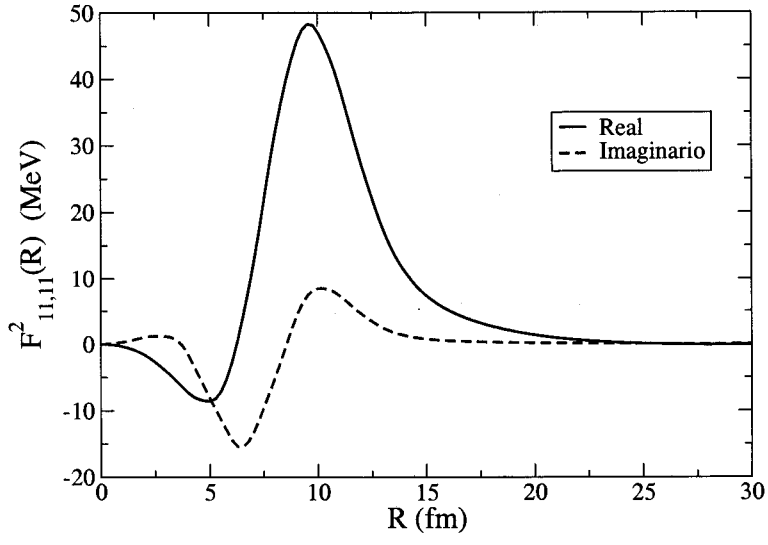


Figura 4.12: *Factor de forma cuadrupolar diagonal para el estado* 1_1^-.

- *HCM* es el paso de integración en R de la ecuación de Schrödinger y por lo tanto es el paso con el que hay que calcular los factores de forma. Se toma como 0,1 fm. No obstante, para reducir el tiempo de cálculo, los factores de forma se han calculado con un paso de 1 fm y después el programa FRESCO ha interpolado internamente. Esto es posible gracias a que los factores de

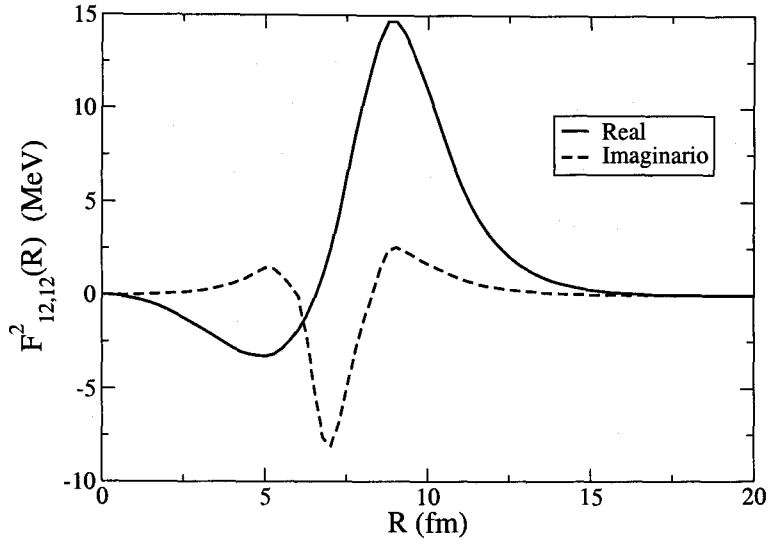


Figura 4.13: *Factor de forma cuadrupolar diagonal para el estado de la resonancia* 2^+.

forma varían suavemente con R.

- $RMATCH$ es el valor de R a partir del cual la solución se empalma con el comportamiento asintótico. Se toma como 200 fm, distancia a la cual la parte real de los factores de forma del estado fundamental al continuo es inferior a 10^{-2} MeV.

- $[JTMIN, JTMAX]$ son los valores de J para los que se resuelven las ecuaciones acopladas. Se toman $JTMIN = 0$ y $JTMAX = 100$.

- $CUTR$ es el valor que se elige para que el programa comience la integración en $R = R_{turn} - CUTR$, donde R_{turn} es el punto de retorno clásico, en vez de en $R = 0$ porque cuando la energía cinética es muy pequeña la función de onda decae muy rápidamente a cero y el cálculo numérico se hace muy inestable. Se toma como 8 fm.

Como ya se ha comentado los resultados que se van a presentar son cálculos que corresponden a una función de onda del estado fundamental con $K_{max} = 8$ e incluyendo $n_b = 2$ excitaciones hiperradiales en cada canal. Conviene recordar que el número de canales para $K_{max} = 8$ es $N_{can} = 15$ para $j^\pi = 0^+$, $N_{can} = 26$ para $j^\pi = 1^-$ y $N_{can} = 46$ para $j^\pi = 2^+$. Tomando los estados con $\varepsilon_{nj} \leq 10$ MeV se tiene en el cálculo un total de $N = 32$ estados que se muestran en la figura

4.14. Además resultan 212 factores de forma monopolares, 256 dipolares y 251 cuadrupolares, independientes y no nulos y que acoplan entre sí todos los estados anteriores.

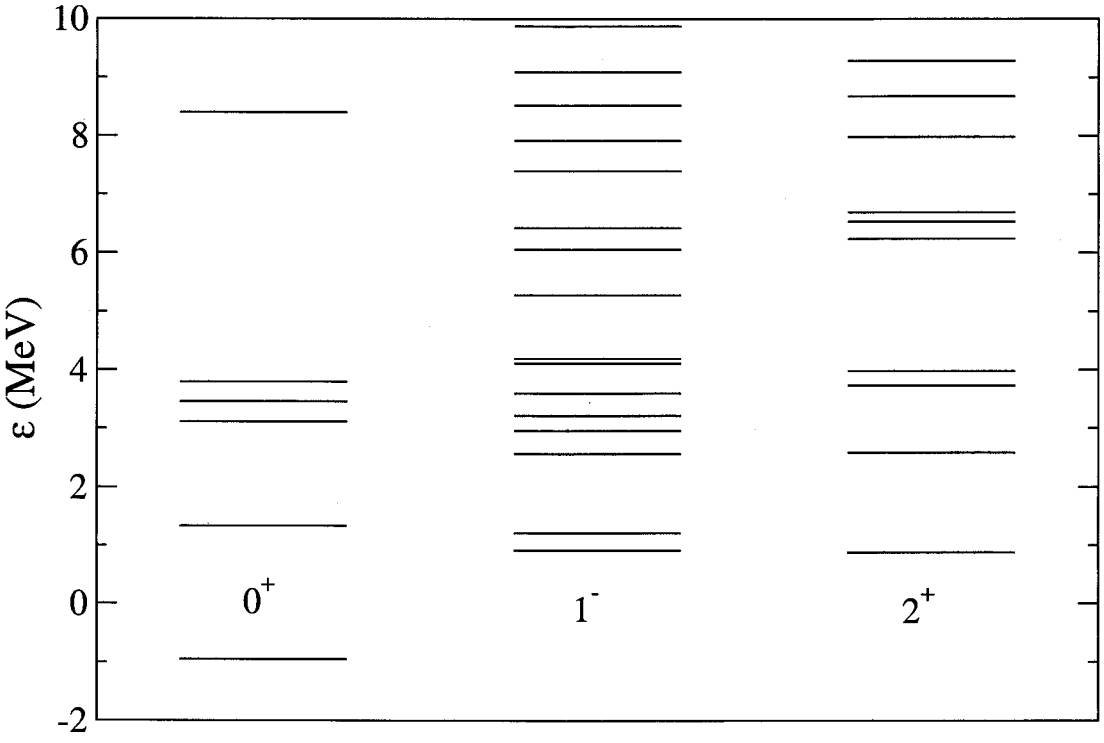


Figura 4.14: *Autovalores de los estados* $j^{\pi} = 0^{+}, 1^{-}, 2^{+}$ *para* $K_{max} = 8$ *y* $n_b = 2$ *por debajo de* $\varepsilon = 10$ *MeV.*

4.3.3. Secciones eficaces

En primer lugar se muestra en la figura 4.15 el diagrama de Argand, donde se representa la parte imaginaria de la matriz de dispersión S elástica frente a la parte real. Cada punto representa un valor del momento angular orbital L del movimiento relativo proyectil-blanco. Se presentan dos líneas, la línea marrón de círculos corresponde al cálculo sólo con el canal elástico sin incluir el continuo mientras la línea negra de rombos representa el cálculo CDCC completo incluyendo el continuo. Como se puede ver el cálculo con un sólo canal es exterior al cálculo CDCC completo. Ello indica que el módulo de la matriz S elástica es inferior en el cálculo CDCC ya que el flujo perdido se va a los canales de ruptu-

ra. Para el cálculo CDCC completo, en torno a $L = 20$ se observa una pequeña discontinuidad que genera unas pequeñas oscilaciones a ángulos pequeños en la sección eficaz diferencial elástica y, de forma más acusada, en la sección eficaz diferencial de ruptura. Probablemente se trata de un efecto no físico, que podría indicar la falta de convergencia para ondas parciales grandes.

En la figura 4.16 se muestra la sección eficaz diferencial elástica en función del ángulo de dispersión en el sistema centro de masas proyectil-blanco. La sección eficaz diferencial elástica del cálculo CDCC completo se presenta comparada con la misma calculada con un sólo canal sin incluir el acoplamiento al continuo. Se observa cómo el *rainbow* del cálculo con un sólo canal desaparece en el cálculo completo, debido fundamentalmente al acoplamiento con los estados dipolares. Esto está relacionado con el mecanismo de la polarizabilidad dipolar, que consiste en la distorsión de un núcleo poco ligado en el campo eléctrico intenso del blanco. También se presentan los datos de Louvain-la-Neuve obtenidos en la tesis doctoral [147] y se ve cómo la sección eficaz diferencial elástica del cálculo CDCC reproduce bastante bien estos datos experimentales. A ángulos hacia detrás el cálculo CDCC completo muestra un aumento de la sección eficaz con respecto al cálculo con un sólo canal, acercándose a los datos experimentales. Se ha comprobado que este efecto se debe fundamentalmente al acoplamiento con los estados cuadrupolares. No obstante, el cálculo subestima los datos experimentales en esta región angular. Hay que hacer notar que en este cálculo no se ha ajustado ningún parámetro, como los potenciales imaginarios, con tal objeto.

También se puede mostrar la sección eficaz diferencial total de ruptura en función del ángulo de dispersión en el sistema centro de masas proyectil-blanco, que se presenta en la figura 4.17 por una línea negra. Como se mencionó anteriormente, se pueden observar unas oscilaciones para ángulos delanteros que podrían estar asociadas a problemas de convergencia para momentos angulares orbitales grandes. Se observa también un máximo en torno a 30° que se debe fundamentalmente a la excitación dipolar coulombiana. Esto se pone de manifiesto al comparar con la sección eficaz diferencial de ruptura del primer estado excitado $j^\pi = 1^-$, representado por una línea azul. Se observa cómo la contribución de este primer estado excitado $j^\pi = 1^-$ es importante para ángulos delanteros reproduciendo el pico en torno a 30°, es decir, que la contribución del continuo de baja energía es importante para momentos angulares orbitales grandes. Por

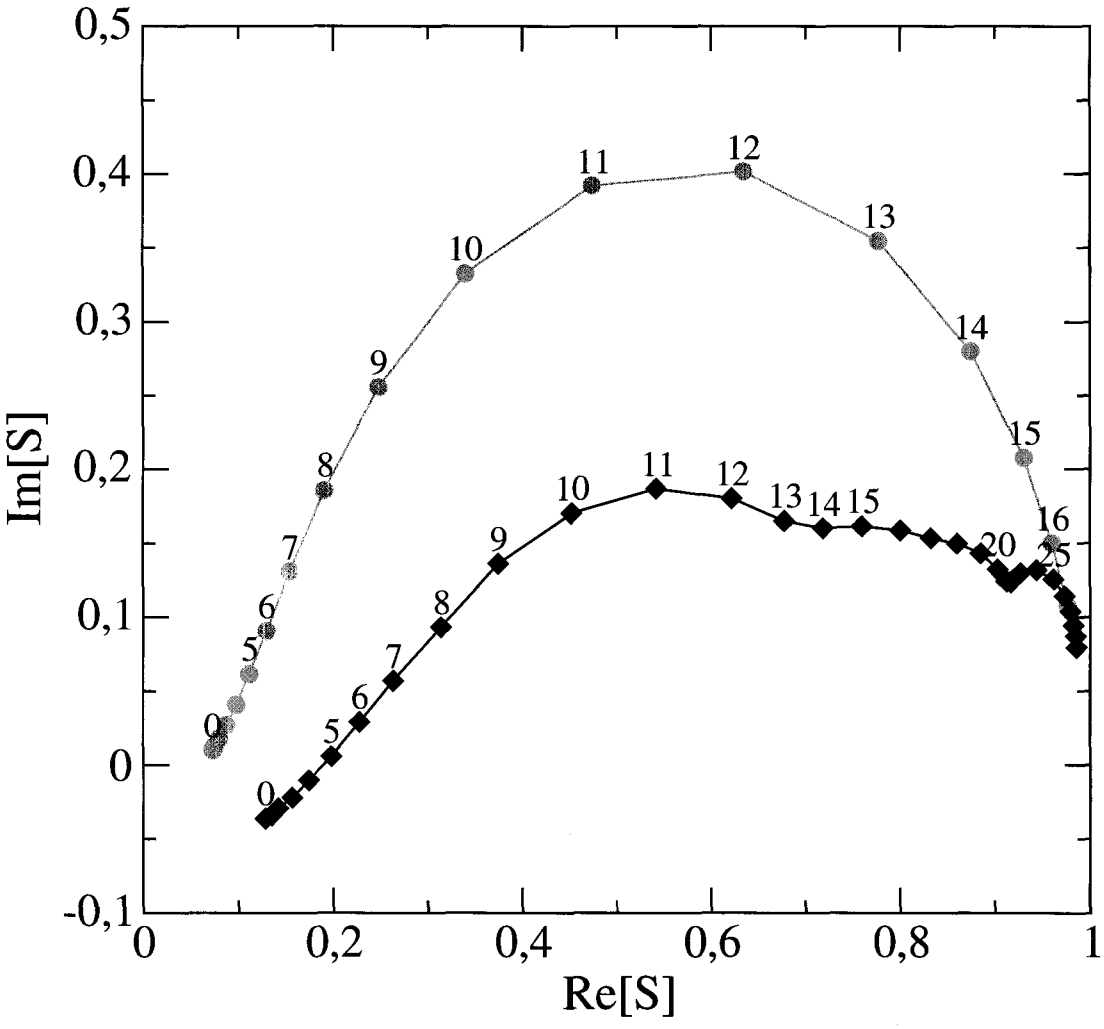


Figura 4.15: *Diagrama de Argand para $K_{max} = 8$, $n_b = 2$, $N = 32$. La línea marrón de círculos corresponde al cálculo sólo con el canal elástico sin incluir el continuo mientras la línea negra de rombos representa el cálculo CDCC completo. Cada punto (círculo o rombo) representa un momento angular orbital L del movimiento relativo proyectil-blanco.*

otra parte, a ángulos hacia detrás el efecto más importante es el de la excitación cuadrupolar a la resonancia $j^{\pi} = 2^{+}$, cuya contribución se representa por una línea roja.

Por último se puede mostrar la sección eficaz diferencial de ruptura como función de la energía de excitación. Para obtener distribuciones continuas a partir de distribuciones discretas se ha utilizado el mismo procedimiento explicado en el

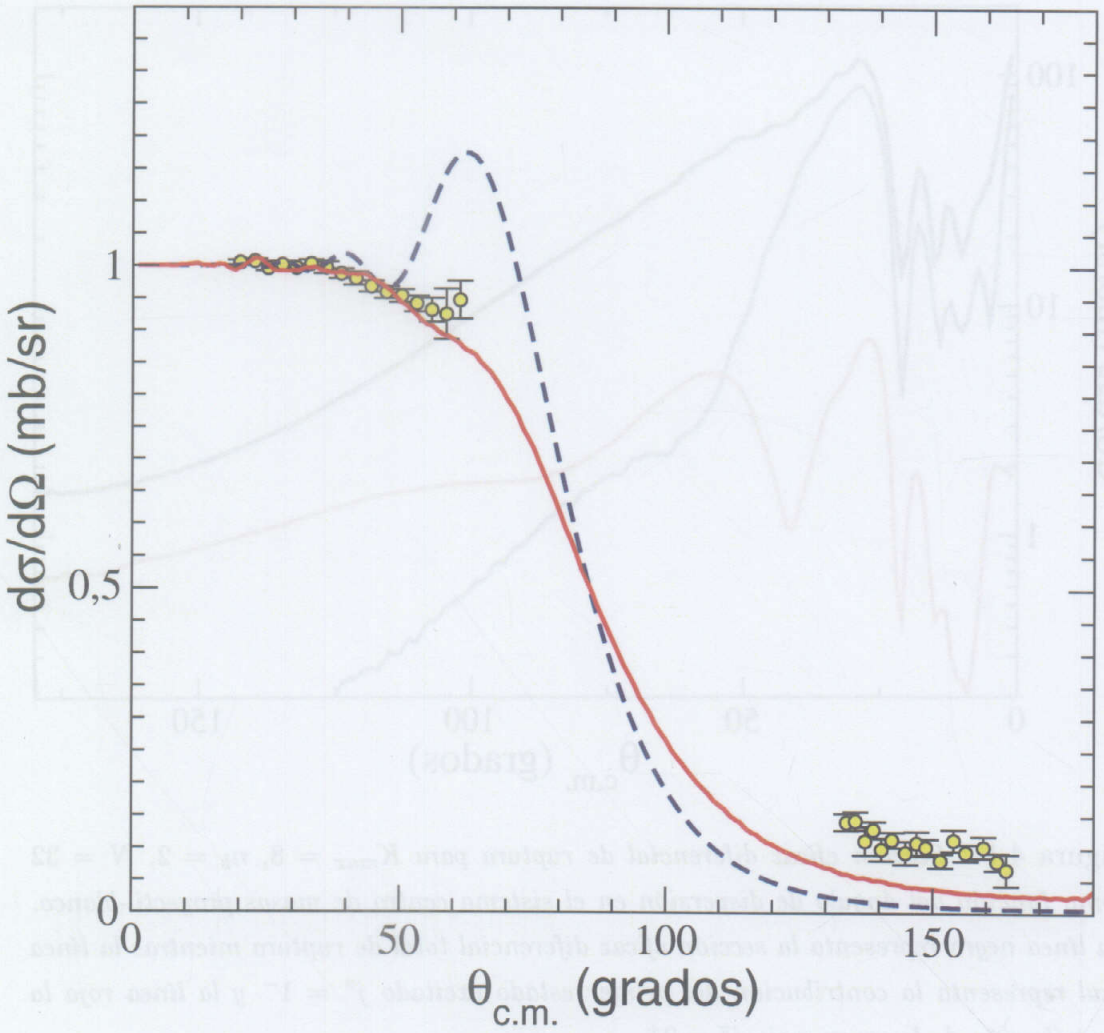


Figura 4.16: *Sección eficaz diferencial elástica para $K_{max} = 8$, $n_b = 2$, $N = 32$ como función del ángulo de dispersión en el sistema centro de masas proyectil-blanco. La línea roja corresponde al cálculo CDCC completo y la línea azul de rayas corresponde al cálculo incluyendo sólo el canal elástico. Ambos cálculos se comparan con los datos de Louvain-la-Neuve representados por círculos amarillos.*

subapartado 3.3.2, sólo que en este caso no se va a considerar el desarrollo análogo a la expresión (3.63) porque se van a ignorar los términos de interferencia en la matriz de dispersión S. De esta manera, la sección eficaz de ruptura como una función de la energía de excitación se obtiene

$$\frac{d\sigma(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \sum_n \sigma_n f_n(\varepsilon, \varepsilon_n), \tag{4.39}$$

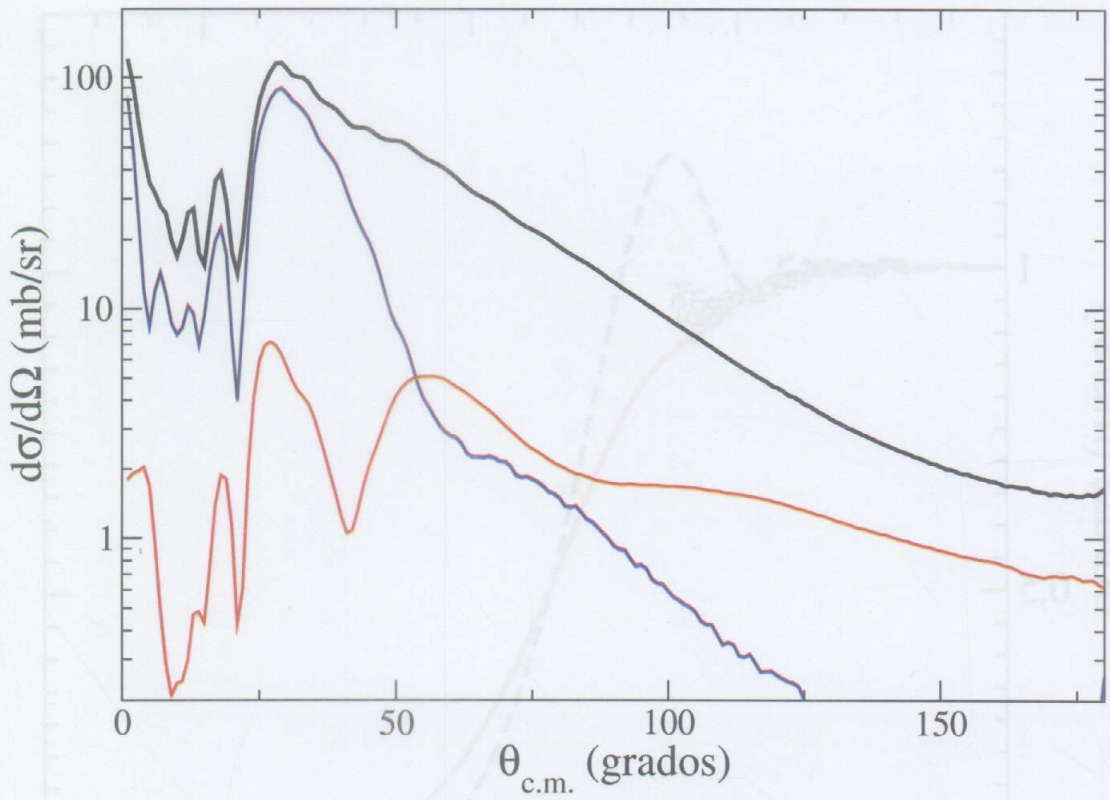


Figura 4.17: *Sección eficaz diferencial de ruptura para* $K_{max} = 8$, $n_b = 2$, $N = 32$ *como función del ángulo de dispersión en el sistema centro de masas proyectil-blanco. La línea negra representa la sección eficaz diferencial total de ruptura mientras la línea azul representa la contribución del primer estado excitado* $j^{\pi} = 1^{-}$ *y la línea roja la contribución de la resonancia* $j^{\pi} = 2^{+}$.

donde la suma en n se extiende a los estados excitados y la distribución $f_n(\varepsilon, \varepsilon_n)$ viene dada por la ecuación (3.62), que la relaciona con las distribuciones de una base grande con N_b excitaciones hiperradiales. De nuevo se toma una base grande con $N_b = 15$ y se le asigna a cada estado una distribución de Poisson dada por la ecuación (3.65) con una m apropiada según el caso.

En la figura 4.18 se muestra por una línea negra la sección eficaz diferencial de ruptura de los estados excitados $j^{\pi} = 0^{+}$, por una línea azul la de los estados $j^{\pi} = 1^{-}$ y por una línea roja la de los estados $j^{\pi} = 2^{+}$. Para los primeros se ha utilizado una distribución de Poisson con $m = 10$, para los segundos con $m = 20$ y para los terceros también con $m = 20$, pero de nuevo, con $m = 1300$ en torno a la energía de la resonancia para obtener una anchura de la misma consistente

con el valor experimental. Se puede ver cómo la distribución correspondiente a $j^\pi = 0^+$ es muy suave, la correspondiente a $j^\pi = 1^-$ es la mayor y presenta un máximo en torno a $\varepsilon = 0{,}5$ MeV y la correspondiente a $j^\pi = 2^+$ presenta un máximo muy acusado en torno a la energía de la resonancia $\varepsilon_R = 0{,}824$ MeV. Estos resultados muestran la importancia de incluir en los cálculos los estados del continuo de baja energía. Además estos resultados confirman que los estados con energía mayores que 10 MeV no contribuyen de forma importante a esta reacción.

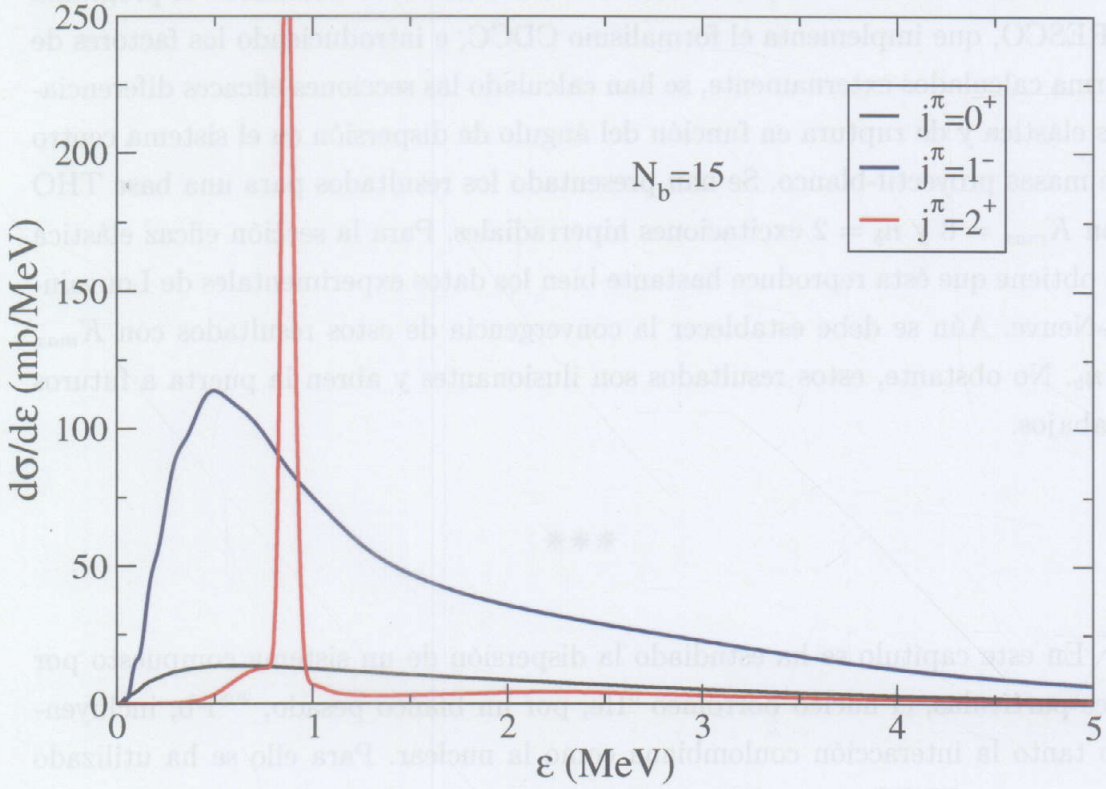


Figura 4.18: *Sección eficaz diferencial de ruptura para $K_{max} = 8$, $n_b = 2$, $N = 32$ como función de la energía de excitación. La línea negra representa la contribución de los estados excitados $j^\pi = 0^+$, la línea azul la contribución de los estados $j^\pi = 1^-$ y la línea roja la contribución de los estados $j^\pi = 2^+$.*

Se puede mencionar aquí otro resultado interesante relacionado con las secciones eficaces integradas. Se tiene que la sección eficaz total de ruptura es 274 mb mientras que la sección eficaz total de reacción es 1447 mb. La sección eficaz de reacción corresponde a todos los procesos no elásticos, incluyendo los de ruptura. Pero otros posibles procesos serían la excitación del blanco, la transferencia de

uno o más nucleones del proyectil al blanco, la fusión del proyectil con el blanco, etc. Estos procesos, exceptuando la ruptura, no se calculan explícitamente en el esquema CDCC pero implícitamente se incluyen a través de la parte imaginaria de los potenciales ópticos usados para la interacciones nucleares α+^{208}Pb y n+^{208}Pb.

En este apartado se han presentado los primeros resultados para la reacción del núcleo borromeo ^{6}He por el blanco ^{208}Pb a 22 MeV. Utilizando el programa FRESCO, que implementa el formalismo CDCC, e introduciendo los factores de forma calculados externamente, se han calculado las secciones eficaces diferenciales elástica y de ruptura en función del ángulo de dispersión en el sistema centro de masas proyectil-blanco. Se han presentado los resultados para una base THO con $K_{max} = 8$ y $n_b = 2$ excitaciones hiperradiales. Para la sección eficaz elástica se obtiene que ésta reproduce bastante bien los datos experimentales de Louvain-la-Neuve. Aún se debe establecer la convergencia de estos resultados con K_{max} y n_b. No obstante, estos resultados son ilusionantes y abren la puerta a futuros trabajos.

***

En este capítulo se ha estudiado la dispersión de un sistema compuesto por tres partículas, el núcleo borromeo ^{6}He, por un blanco pesado, ^{208}Pb, incluyendo tanto la interacción coulombiana como la nuclear. Para ello se ha utilizado el esquema CDCC tomando como estados internos del proyectil los generados con el método de discretización THO y calculando la forma particular de los potenciales de acoplamiento en el caso de tal sistema proyectil-blanco. Se han presentado resultados para una base THO con $K_{max} = 8$ y $n_b = 2$, mostrándose tanto la sección eficaz diferencial elástica como la de ruptura. Estos resultados se presentarán próximamente en el artículo [153].

Capítulo 5

Resumen y conclusiones

El objetivo de este trabajo es extender y generalizar el método de discretización del continuo basado en polinomios ortogonales (Orthogonal Polynomial, OP), introducido recientemente. Este método proporciona una base discreta, completa y ortonormal de estados que describen tanto los estados ligados como el continuo de energía. Por un lado, en este trabajo se ha aplicado el método a la descripción del continuo resonante de un sistema de dos cuerpos con simetría esférica, con el propósito de construir estados normalizables que representen a las resonancias. Por otro lado, se ha generalizado el método de discretización para su aplicación a un sistema de tres cuerpos, con el propósito de estudiar tanto la estructura como las reacciones de núcleos formados por tres partículas, como el núcleo borromeo ^{6}He.

El trabajo realizado y las conclusiones obtenidas se pueden resumir en los siguientes puntos:

- Se ha descrito la estructura del continuo de un problema de dos cuerpos con simetría esférica, centrándose en los estados con momento angular orbital $l = 0$. Para ello, se ha utilizado el potencial de Ginocchio comparando dos casos, uno sin resonancias, el caso Pöschl-Teller (PT), y otro con resonancias, al cual se hace referencia como caso Ginocchio (G) y que se ha elegido de modo que se optimice el estudio de la primera resonancia. Ambos potenciales se han escogido de tal manera que tengan un único estado ligado, con la misma energía de ligadura y el mismo radio cuadrático medio.

- Para discretizar el continuo de energía del sistema de dos cuerpos se ha

usado el método OP. Dentro de este método general se han desarrollado dos métodos particulares, el método del oscilador armónico transformado (Transformed Harmonic Oscillator, THO) y el método de polinomios ortogonales en la variable trivial (Trivial Orthogonal Polynomial, TOP). En ambos métodos, el hamiltoniano se ha diagonalizado en la base discreta y ortonormal correspondiente, para un número de estados dado, obteniéndose los autoestados y autovalores que se toman como representativos tanto del estado ligado como del continuo de energía.

- Se ha desarrollado, utilizando primero el método THO, un procedimiento para localizar el estado que corresponde a la resonancia y que no es, en general, un autoestado del hamiltoniano en una base THO finita. La idea de este procedimiento se basa en el hecho de que el estado que representa a la resonancia no debe estar fuertemente conectado con los estados que quedan fuera del subespacio THO, ya que una base THO truncada describe siempre mejor las proximidades del pozo de potencial y que un estado resonante está localizado fundamentalmente dentro del pozo. De esta manera, se empieza considerando los autoestados del operador Δ_N^2, que mide el acoplamiento entre los estados que están dentro y los que quedan fuera del subespacio THO. Conforme el tamaño de la base aumenta, se muestra que los valores esperados del hamiltoniano en esta base decrecen monótonamente para el potencial no resonante PT. Sin embargo, para el potencial resonante G, algunos autoestados de Δ_N^2 muestran un aumento en el valor esperado del hamiltoniano. Estos estados, que son autoestados de Δ_N^2 y presentan un valor esperado de la energía relativamente grande, se identifican como las resonancias en la base THO. Hasta el tamaño de la base máximo considerado en este trabajo se han observado las tres primeras resonancias del caso G aunque sólo para la primera se obtiene una descripción adecuada; para obtener una descripción mejor de la segunda y tercera se necesitan bases mayores.

- Se ha investigado el acoplamiento del estado fundamental con el continuo, considerándose la función de excitación asociada al operador r. Se encuentra que, para el caso no resonante, PT, la función de excitación es una función suave del momento asintótico del estado del continuo, mientras en el caso

resonante, G, hay una estructura resonante característica para el momento próximo a la resonancia. La base THO, con un número pequeño de estados, describe con gran precisión la función de excitación en ambos casos. Más aun, se encuentra que la resonancia THO describe bien la contribución a la excitación en la energía de la resonancia.

- Se puede concluir que la base THO proporciona una representación adecuada del continuo, tanto resonante como no resonante. Esto permite construir un único estado que represente cada resonancia. La diferencia entre las funciones de excitación en los casos resonante y no resonante puede ser entendida y calculada en la base THO.

- Con el objetivo de mostrar que el procedimiento desarrollado para describir resonancias no es característico de la base discreta utilizada, se ha desarrollado el mismo proceso aplicando el método TOP. Se comprueba que el procedimiento desarrollado con el método THO para identificar las resonancias es aplicable con el método TOP. Se puede concluir que el método presentado para describir resonancias es general para cualquier base discreta que sea completa en todo el espacio.

- Se ha generalizado el método THO para su aplicación a un sistema que se componga de tres partículas. Para ello, primero se hace un desarrollo del estado fundamental en armónicos hiperesféricos (Hyperspherical Harmonics, HH), denominándose canal a las diferentes componentes del desarrollo, y después se aplica el método THO a cada canal incluido en el estado fundamental. Para el caso de canales no incluidos en el estado fundamental hay que elegir un estado semilla a partir de los canales incluidos en el mismo, que es la única información de la que se parte para la aplicación del método.

- Una vez establecido el método de discretización, se ha estudiado la estructura del continuo del núcleo borromeo ^{6}He, que se considera formado por $\alpha + n + n$ y cuyo estado fundamental corresponde a momento angular total $j^\pi = 0^+$. Para la aplicación del método lo único que hace falta conocer es la función de onda del estado fundamental desarrollada en HH. Después se calcula la transformación local de escala para cada canal y se construye la base THO correspondiente. El proceso se realiza para los momentos angu-

lares totales $j^\pi = 0^+, 1^-, 2^+$. Una vez construida la base THO se calculan los elementos de matriz del hamiltoniano del sistema y tomando una base THO finita con n_b excitaciones hiperradiales en cada canal, se diagonaliza el hamiltoniano y se obtienen los autoestados y autovalores que se toman como representativos tanto del estado ligado como del continuo de energía. En el caso de $j^\pi = 2^+$ aparece un estado muy estable conforme aumenta n_b en torno a la energía experimental de la resonancia 2^+ de ^{6}He, por lo que este estado podría ser representativo de la resonancia.

- Se ha estudiado el acoplamiento del estado fundamental con el continuo a través del operador monopolar ρ^2 y los operadores dipolar y cuadrupolar eléctricos, evaluando diferentes funciones de intensidad como la intensidad total, la suma pesada en la energía y la polarizabilidad. El primer operador acopla el estado fundamental con el resto de estados excitados $j^\pi = 0^+$ mientras el segundo y el tercero lo hacen con los estados $j^\pi = 1^-$ y $j^\pi = 2^+$, respectivamente. En todos los casos se observa cómo las funciones de intensidad convergen muy rápidamente conforme el tamaño de la base THO aumenta. De manera que se concluye que una base THO con un número de estados relativamente bajo, $n_b = 4$ excitaciones hiperradiales en cada canal, es suficiente para describir el efecto del continuo de diferentes observables de estructura.

- Se han presentado las distribuciones suavizadas de $B(E1)$ y $B(E2)$ convergidas para una base THO con $n_b = 4$ excitaciones hiperradiales y se han comparado con las correspondientes distribuciones calculadas con funciones de onda de dispersión del continuo. El acuerdo entre ambos cálculos es bueno. Además, de la distribución de $B(E2)$ se obtiene que el autoestado de $j^\pi = 2^+$ que tiene una energía en torno a la energía experimental de la resonancia 2^+ de ^{6}He reproduce el efecto de ésta, con lo cual se puede concluir que este único estado es representativo de la resonancia.

- Se ha desarrollado el formalismo para describir la colisión entre un proyectil compuesto por tres partículas y un blanco, utilizando el método de canales acoplados discretizados en el continuo (Continuum Discretized Coupled Channels, CDCC). Para ello, se ha obtenido la expresión de los potenciales de acoplamiento para un sistema de cuatro cuerpos, proyectil de tres cuer-

pos más blanco, utilizando como estados internos del proyectil los generados con el método de discretización THO y haciendo un desarrollo multipolar de la interacción proyectil-blanco.

- Este formalismo se ha aplicado a la reacción ^{6}He+^{208}Pb a 22 MeV, teniendo en cuenta tanto la interacción coulombiana como nuclear y considerando el acoplamiento al continuo. Para ello, se han incluido los estados con momentos angulares totales $j^{\pi} = 0^{+}, 1^{-}, 2^{+}$ y los multipolos $Q = 0, 1, 2$. Se han calculado, para una base THO con $n_b = 2$ excitaciones hiperradiales en cada canal, las secciones eficaces diferenciales elástica y de ruptura en función del ángulo de dispersión en el centro de masas del sistema proyectil-blanco así como las secciones eficaces diferenciales de ruptura en función de la energía de excitación. Estos cálculos muestran la relevancia de incluir el acoplamiento a los estados $j^{\pi} = 1^{-}, 2^{+}$ de baja energía.

- Se puede concluir que estos resultados muestran que el procedimiento presentado para el estudio de reacciones en las que el proyectil se compone de tres partículas es eficiente para describir explícitamente el efecto del acoplamiento al continuo en las colisiones de sistemas poco ligados.

Como conclusión general, se encuentra que una base THO es adecuada para describir el continuo de energía de sistemas de dos y tres cuerpos, tanto de su parte resonante como no resonante y tanto para observables de estructura como para reacciones. También la base TOP y, por tanto, la base OP en general es adecuada para describir el continuo de un sistema de dos cuerpos y se podrá generalizar, de forma análoga al caso THO, para sistemas de tres cuerpos.

El objetivo, en el futuro próximo, es aplicar el procedimiento presentado para el estudio de reacciones de sistemas débilmente ligados al análisis de los datos experimentales de secciones eficaces de dispersión de núcleos con halo.

Apéndice A

Herramientas para el tratamiento de sistemas de tres cuerpos

En este apéndice se van a presentar algunas herramientas útiles para tratar un sistema de tres cuerpos, como son las coordenadas de Jacobi e hiperesféricas, los armónicos hiperesféricos y la base del oscilador armónico en 6 dimensiones. Este apéndice será de utilidad tanto en el la introducción como en los capítulos 3 y 4.

A.1. Coordenadas

Como se va a tratar un sistema de tres cuerpos se va a trabajar en 6 dimensiones (6D). Por lo tanto se necesita un conjunto de coordenadas apropiadas para trabajar en 6D, como son las coordenadas de Jacobi y las coordenadas hiperesféricas. Se van a presentar primero las coordenadas de Jacobi para obtener posteriormente las coordenadas hiperesféricas.

A.1.1. Coordenadas de Jacobi

Se tienen tres partículas con masas m_l y vectores de posición $\vec{r}_l$ con $l = 1, 2, 3$. Se pueden definir tres conjuntos de coordenadas de Jacobi diferentes $\{\vec{x}_i, \vec{y}_i\}$ con $i = 1, 2, 3$, siendo

- $\vec{x}_i$: coordenada relativa entre dos partículas j, k

$$\vec{x}_i = (\vec{r}_j - \vec{r}_k)\sqrt{\frac{a_{x_i}}{m}}, \tag{A.1}$$

- $\vec{y}_i$: coordenada que une el centro de masas del subsistema $\{j, k\}$ con la partícula i

$$\vec{y}_i = \left(\vec{r}_i - \frac{m_j\vec{r}_j + m_k\vec{r}_k}{m_j + m_k}\right)\sqrt{\frac{a_{y_i}}{m}}, \tag{A.2}$$

donde los índices (i, j, k) toman los valores $(1, 2, 3)$ en orden cíclico. Aquí a_{x_i} es la masa reducida del subsistema $\{j, k\}$, a_{y_i} la del subsistema $\{j, k\}$ respecto a la partícula i, es decir,

$$a_{x_i} = \frac{m_j m_k}{m_j + m_k}, \tag{A.3}$$

$$a_{y_i} = \frac{m_i(m_j + m_k)}{m_i + m_j + m_k} \tag{A.4}$$

y m es una masa de normalización arbitraria que se toma como la masa del nucleón. En la figura A.1 se presenta un esquema de las coordenadas de Jacobi.

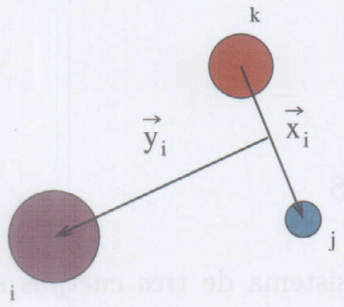


Figura A.1: *Coordenadas de Jacobi.*

Estos tres conjuntos están relacionados entre ellos de la forma siguiente

$$\vec{x}_k = -\cos\varphi_{ki}\,\vec{x}_i + \operatorname{sen}\varphi_{ki}\,\vec{y}_i, \tag{A.5}$$

$$\vec{y}_k = -\operatorname{sen}\varphi_{ki}\,\vec{x}_i - \cos\varphi_{ki}\,\vec{y}_i, \tag{A.6}$$

donde

$$\varphi_{ki} = \arctan\left[(-1)^P\sqrt{\frac{(m_i + m_j + m_k)m_j}{m_i m_k}}\right] \tag{A.7}$$

con P par si (ijk) es una permutación par de $(1,2,3)$.

Si $\vec{R}$ es la posición del centro de masas respecto a un origen de referencia,

$$\vec{R} = \frac{m_i\vec{r}_i + m_j\vec{r}_j + m_k\vec{r}_k}{M}, \tag{A.8}$$

siendo $M = m_i + m_j + m_k$ la masa total, las posiciones de las partículas respecto a ese origen se pueden expresar entonces como

$$\vec{r}_i = \vec{R} + \frac{m_j + m_k}{M}\sqrt{\frac{m}{a_{y_i}}}\vec{y}, \tag{A.9}$$

$$\vec{r}_j = \vec{R} - \frac{m_i}{M}\sqrt{\frac{m}{a_{y_i}}}\vec{y} + \frac{m_k}{(m_j + m_k)}\sqrt{\frac{m}{a_{x_i}}}\vec{x}, \tag{A.10}$$

$$\vec{r}_k = \vec{R} - \frac{m_i}{M}\sqrt{\frac{m}{a_{y_i}}}\vec{y} - \frac{m_j}{(m_j + m_k)}\sqrt{\frac{m}{a_{x_i}}}\vec{x}. \tag{A.11}$$

A.1.2. Coordenadas hiperesféricas

A partir de las coordenadas de Jacobi se pueden definir las coordenadas hiperesféricas. Así el hiperradio, ρ, independiente del sistema de Jacobi elegido, se define como

$$\rho^2 \equiv x_1^2 + y_1^2 = x_2^2 + y_2^2 = x_3^2 + y_3^2. \tag{A.12}$$

Esto permite expresar el módulo de los vectores $\vec{x}_i$ e $\vec{y}_i$ de la forma siguiente

$$x_i = \rho \operatorname{sen}\alpha_i, \tag{A.13}$$

$$y_i = \rho \cos\alpha_i, \tag{A.14}$$

donde α_i es el hiperángulo, que depende del sistema elegido,

$$\tan\alpha_i = \frac{x_i}{y_i}. \tag{A.15}$$

De esta forma el conjunto de coordenadas hiperesféricas correspondiente a cada conjunto de coordenadas de Jacobi es $\{\rho, \Omega_i\}$ donde $\Omega_i \equiv \{\alpha_i, \widehat{x}_i, \widehat{y}_i\}$, siendo $\widehat{x}_i$ e $\widehat{y}_i$ los ángulos asociados a las coordenadas $\vec{x}_i$ e $\vec{y}_i$, respectivamente.

A.2. Armónicos hiperesféricos

Los armónicos hiperesféricos son la extensión en 6D de los armónicos esféricos en 3 dimensiones. Los armónicos esféricos $\{Y_{lm_l}\}$ son las autofunciones del operador momento angular orbital al cuadrado $\widehat{l}^2$,

$$\widehat{l}^2 Y_{lm_l}(\widehat{r}) = l(l+1)Y_{lm_l}(\widehat{r}), \tag{A.16}$$

elegidas de tal manera que sean también autofunciones de la componente z del momento angular orbital $\widehat{l}_z$,

$$\widehat{l}_z Y_{lm_l}(\widehat{r}) = m_l Y_{lm_l}(\widehat{r}). \tag{A.17}$$

Los operadores $\{\widehat{l}^2, \widehat{l}_z\}$ forman un conjunto completo en este subespacio y $\{Y_{lm_l}\}$ son una base completa y ortonormal.

De manera análoga, en 6D los armónicos hiperesféricos $\{\Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}\}$ son las autofunciones del operador momento hiperangular o hipermomento al cuadrado[1] $\widehat{K}^2$,

$$\widehat{K}^2 \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = K(K+4)\Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega), \tag{A.18}$$

elegidas de tal forma que sean también autofunciones de los momentos angulares orbitales al cuadrado asociados a las coordenadas $\vec{x}$ e $\vec{y}$, $\widehat{l}_x^2$ y $\widehat{l}_y^2$, y sus correspondientes componentes z, $\widehat{l}_{x,z}$ y $\widehat{l}_{y,z}$. Así se tiene

$$\widehat{l}_x^2 \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = l_x(l_x+1)\Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega), \tag{A.19}$$

$$\widehat{l}_y^2 \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = l_y(l_y+1)\Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega), \tag{A.20}$$

$$\widehat{l}_{x,z} \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = m_x \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega), \tag{A.21}$$

$$\widehat{l}_{y,z} \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = m_y \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega). \tag{A.22}$$

De igual manera $\{\widehat{K}^2, \widehat{l}_x^2, \widehat{l}_y^2, \widehat{l}_{x,z}, \widehat{l}_{y,z}\}$ también forman un conjunto completo en este subespacio y los armónicos hiperesféricos $\{\Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}\}$ son una base completa y ortonormal, cumpliéndose la relación de ortonormalidad

$$\int d\Omega\ \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega)^* \Upsilon_{K'}^{l'_x l'_y m'_x m'_y}(\Omega) = \delta_{KK'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{m_x m'_x}\delta_{m_y m'_y}, \tag{A.23}$$

donde el elemento de volumen es $d\Omega = (\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\widehat{x}\ d\widehat{y}$.

[1] Se obvia el subíndice i que denota los diferentes sistemas de Jacobi

La expresión del operador $\widehat{K}^2$ en función de los ángulos Ω es la siguiente

$$\widehat{K}^2 = -\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2} - 4\cot 2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{\cos^2\alpha}\widehat{l}_x^2 + \frac{1}{\text{sen}^2\,\alpha}\widehat{l}_y^2. \tag{A.24}$$

Cabe comentar que este operador es invariante bajo la transformación entre diferentes conjuntos de coordenadas de Jacobi, es decir,

$$\widehat{K}^2(\Omega_i) = \widehat{K}^2(\Omega_j) = \widehat{K}^2(\Omega_k). \tag{A.25}$$

Los armónicos hiperesféricos se pueden expresar de la forma siguiente

$$\Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega) = \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) Y_{l_x m_x}(\widehat{x}) Y_{l_y m_y}(\widehat{y}), \tag{A.26}$$

donde $Y_{l_x m_x}(\widehat{x})$ e $Y_{l_y m_y}(\widehat{y})$ son los armónicos esféricos asociados a las coordenadas $\vec{x}$ e $\vec{y}$, respectivamente, y la función $\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)$ es

$$\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) = N_K^{l_x l_y}(\text{sen}\,\alpha)^{l_x}(\cos\alpha)^{l_y} P_n^{l_x+1/2, l_y+1/2}(\cos 2\alpha). \tag{A.27}$$

Aquí $P_n^{a,b}(\beta)$ es un polinomio de Jacobi de orden

$$n = (K - l_x - l_y)/2 \tag{A.28}$$

y $N_K^{l_x l_y}$ es la constante de normalización,

$$N_K^{l_x l_y} = \left[\frac{2n!(K+2)(n+l_x+l_y+1)!}{\Gamma(n+l_x+3/2)\Gamma(n+l_y+3/2)}\right]^{1/2}. \tag{A.29}$$

Como el índice n ha de ser entero positivo o cero se deduce de la ecuación (A.28) que K toma los valores enteros mayores o iguales que $(l_x + l_y)$ de dos en dos unidades, $K = l_x + l_y, l_x + l_y + 2, \ldots$

También es posible construir armónicos hiperesféricos que sean autoestados de los operadores $\{\widehat{K}^2, \widehat{l}_x^2, \widehat{l}_y^2, \widehat{l}^2, \widehat{l}_z\}$, donde $\vec{l} = \vec{l}_x + \vec{l}_y$ y $\widehat{l}_z$ es su correspondiente componente z, que también constituyen un conjunto completo en este subespacio. Así se tiene

$$\Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega) = \sum_{m_x m_y} \langle l_x m_x l_y m_y | l m_l \rangle \Upsilon_K^{l_x l_y m_x m_y}(\Omega). \tag{A.30}$$

Estos armónicos hiperesféricos tienen un momento angular orbital total l bien definido y cumplen la relación de ortonormalidad

$$\int d\Omega\ \Upsilon_{Klm_l}^{l_x l_y}(\Omega)^* \Upsilon_{K'l'm_l'}^{l_x' l_y'}(\Omega) = \delta_{KK'}\delta_{l_x l_x'}\delta_{l_y l_y'}\delta_{ll'}\delta_{m_l m_l'}. \tag{A.31}$$

Por último, teniendo en cuenta la propiedad (A.25) debe ser posible expresar las autofunciones para un conjunto de coordenadas de Jacobi en términos de las correspondientes de otros conjuntos. Así se tiene

$$\Upsilon^{l_{xi}l_{yi}}_{Klm_l}(\Omega) = \sum_{l_{xk}l_{yk}} \langle l_{xi}l_{yi}|l_{xk}l_{yk}\rangle_{lK} \Upsilon^{l_{xk}l_{yk}}_{Klm_l}(\Omega). \tag{A.32}$$

Esta transformación recibe el nombre de Raynal-Revai. Los coeficientes de la transformación $\langle l_{xi}l_{yi}|l_{xk}l_{yk}\rangle_{lK}$ obedecen una expresión analítica [148]. Se puede observar cómo esta transformación conserva el momento angular orbital total l así como su proyección m_l. También teniendo en cuenta las propiedades, (A.12) y (A.25), conserva el momento hiperangular K.

A.3. Base del oscilador armónico (HO)

La base del oscilador armónico (Harmonic Oscillator, HO) en 6D tiene la forma siguiente

$$\phi^{HO}_{i\gamma}(s,\Omega) = R^{HO}_{iK}(s)\Upsilon^{l_xl_y}_{Klm_l}(\Omega), \tag{A.33}$$

donde:

- i: número cuántico principal
- $\gamma \equiv \{K, l_x, l_y, l, m_l\}$.

La parte angular e hiperangular son los armónicos hiperesféricos mientras que la parte hiperradial es

$$R^{HO}_{iK}(s) = \mathcal{N}_{iK} s^K L_i^{K+2}(s^2) \exp(-s^2/2), \tag{A.34}$$

donde $\mathcal{N}_{iK}$ es la constante de normalización

$$\mathcal{N}_{iK} = \sqrt{\frac{2\Gamma(i+1)}{\Gamma(i+K+3)}} \tag{A.35}$$

y $L_i^A(x)$ es un polinomio generalizado de Laguerre. Para cada K fijo, las funciones $\left(R^{HO}_{iK}\right)_i$ satisfacen la relación de ortonormalidad

$$\int_0^\infty ds\ s^5 R^{HO}_{iK}(s) R^{HO}_{i'K}(s) = \delta_{ii'}. \tag{A.36}$$

Se puede definir la función hiperradial, $U_{iK}^{HO}(s)$, de la forma siguiente

$$U_{iK}^{HO}(s) = s^{5/2} R_{iK}^{HO}(s), \tag{A.37}$$

de tal modo que la relación de ortonormalidad quede

$$\int_0^\infty ds\; U_{iK}^{HO}(s) U_{i'K}^{HO}(s) = \delta_{ii'}. \tag{A.38}$$

Apéndice B

Desarrollos algebraicos relevantes para el capítulo 3

En este apéndice, siguiendo la notación y las definiciones de Brink y Satchler [142], se van a mostrar los desarrollos algebraicos para la obtención de una fórmula cerrada para la probabilidad de transición reducida, $B(E\lambda)$, del operador multipolar eléctrico así como las reglas de suma de la misma para $\lambda = 1, 2$. El resultado de estos desarrollos se utilizará en el apartado 3.3 del capítulo 3.

B.1. Expresión cerrada para $B(E\lambda)$

El operador multipolar eléctrico viene dado por la ecuación (3.52) y su probabilidad de transición reducida por la ecuación (3.53), donde el elemento de matriz reducido, $\langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle$, es

$$\langle nj\mu|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}|n'j'\mu'\rangle = (-1)^{2\lambda}\langle j\mu|j'\mu'\lambda M_\lambda\rangle\langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle. \tag{B.1}$$

El elemento de matriz $\langle nj\mu|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}|n'j'\mu'\rangle$ tiene la expresión, teniendo en cuenta que el ket $|nj\mu\rangle$ denota la función de onda (3.11) y que el operador es indepen-

diente de las variables de espín,

$$\begin{aligned}
\langle njm|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}|n'j'm'\rangle &= \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{\lambda}} Ze \left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda \langle njm|y^\lambda Y_{\lambda M_\lambda}(\widehat{y})|n'j'm'\rangle \\
&= \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{\lambda}} Ze \left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \\
&\times \sum_{\nu\nu'\iota\iota'} \langle j_{ab}\nu I\iota|j\mu\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota'|j'\mu'\rangle\delta_{\iota\iota'} \\
&\times \sum_{m_l m'_l \sigma\sigma'} \langle lm_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l'm'_l S'_x\sigma'|j'_{ab}\nu'\rangle\delta_{S_x S'_x}\delta_{\sigma\sigma'} \\
&\times \int\int d\Omega\, d\rho \Upsilon^{l_x l_y}_{Klm_l}(\Omega)^* U^{THO}_{i\beta}(\rho) y^\lambda Y_{\lambda M_\lambda}(\widehat{y}) U^{THO}_{i'\beta'}(\rho) \Upsilon^{l'_x l'_y}_{K'l'm'_l}(\Omega).
\end{aligned} \tag{B.2}$$

De las ecuaciones (A.26) y (A.30) se tiene

$$\begin{aligned}
\langle njm|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}|n'j'm'\rangle &= \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{\lambda}} Ze \left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \delta_{S_x S'_x} \\
&\times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|j\mu\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota|j'\mu'\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle lm_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l'm'_l S_x\sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
&\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U^{THO}_{i\beta}(\rho)\varphi^{l_x l_y}_K(\alpha) y^\lambda \varphi^{l'_x l'_y}_{K'}(\alpha) U^{THO}_{i'\beta'}(\rho) \\
&\times \sum_{m_x m'_x} \sum_{m_y m'_y} \langle l_x m_x l_y m_y|lm_l\rangle\langle l'_x m'_x l'_y m'_y|l'm'_l\rangle \\
&\times \int\int d\widehat{x}\, d\widehat{y}\, Y_{l_x m_x}(\widehat{x})^* Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{\lambda M_\lambda}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) Y_{l'_x m'_x}(\widehat{x}).
\end{aligned} \tag{B.3}$$

Aquí se tiene, por un lado

$$\int d\widehat{x}\, Y_{l_x m_x}(\widehat{x})^* Y_{l'_x m'_x}(\widehat{x}) = \delta_{l_x l'_x}\delta_{m_x m'_x}, \tag{B.4}$$

y por el otro, usando la relaciones

$$Y_{Aa}(\widehat{r})^* = (-1)^a Y_{A-a}(\widehat{r}), \tag{B.5}$$

$$\int d\widehat{r} Y_{Aa}(\widehat{r}) Y_{Bb}(\widehat{r}) Y_{Dd}(\widehat{r}) = \frac{\hat{A}\hat{B}\hat{D}}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} A & B & D \\ a & b & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A & B & D \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{B.6}$$

se tiene

$$\int d\widehat{y}\, Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{\lambda M_\lambda}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) = (-1)^{m_y} \frac{\hat{l}_y \hat{\lambda} \hat{l}'_y}{\sqrt{4\pi}} \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ -m_y & M_\lambda & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{B.7}$$

Así queda la expresión

$$\begin{aligned}\langle njm|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}|n'j'm'\rangle &= \frac{\sqrt{4\pi}}{\hat{\lambda}} Ze \left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \\ &\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^\lambda \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\ &\times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|j\mu\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota|j'\mu'\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l' m'_l S_x\sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\ &\times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle\langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle (-1)^{m_y} \frac{\hat{l}_y \hat{l}'_y \hat{\lambda}}{\sqrt{4\pi}} \\ &\times \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ -m_y & M_\lambda & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{B.8}$$

Aplicando la relación

$$\langle ab\alpha\beta|c-\gamma\rangle = (-1)^{a-b-\gamma}\hat{c} \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & \gamma \end{pmatrix} \tag{B.9}$$

se pueden transformar los Clebsch-Gordan de la ecuación (B.8) en símbolos 3-j. Se tiene

$$\begin{aligned}&\sum_{\nu\nu'\iota} \sum_{m_l m'_l \sigma} \sum_{m_y m'_y m_x} \langle j_{ab}\nu I\iota|j\mu\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota|j'\mu'\rangle\langle l m_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l' m'_l S_x\sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\ &\times \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle\langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle (-1)^{m_y} \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ -m_y & M_\lambda & m'_y \end{pmatrix} \\ &= \sum_{\nu\nu'\iota} \sum_{m_l m'_l \sigma} \sum_{m_y m'_y m_x} \hat{j}\hat{j}'\hat{j}_{ab}\hat{j}'_{ab}\hat{l}\hat{l}' (-1)^{j_{ab}+j'_{ab}-2I+l+l'-2S_x+l_y+l'_y+\mu+\mu'+\nu+\nu'+m_l+m'_l+m_y} \\ &\times \begin{pmatrix} j_{ab} & I & j \\ \nu & \iota & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_{ab} & I & j' \\ \nu' & \iota & -\mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l & S_x & j_{ab} \\ m_l & \sigma & -\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & S_x & j'_{ab} \\ m'_l & \sigma & -\nu' \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} l_x & l_y & l \\ m_x & m_y & -m_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_x & l'_y & l' \\ m_x & m'_y & -m'_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ -m_y & M_\lambda & m'_y \end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{B.10}$$

Aplicando la relación

$$\begin{aligned}W(abcd;ef) \begin{pmatrix} c & a & f \\ \gamma & \alpha & \phi \end{pmatrix} &= \sum_{\beta\delta\epsilon} (-1)^{f-e-\alpha-\delta} \begin{pmatrix} a & b & e \\ \alpha & \beta & -\epsilon \end{pmatrix} \\ &\times \begin{pmatrix} d & c & e \\ \delta & \gamma & \epsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} b & d & f \\ \beta & \delta & -\phi \end{pmatrix},\end{aligned} \tag{B.11}$$

se tiene

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_x m_y m'_y} (-1)^{m_y} \begin{pmatrix} l_x & l_y & l \\ m_x & m_y & -m_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ -m_y & M_\lambda & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_x & l'_y & l' \\ m_x & m'_y & -m'_l \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+l'_y+m'_l} \sum_{m_x m_y m'_y} (-1)^{l-l'_y+m'_l-m_y} \begin{pmatrix} l_x & l_y & l \\ m_x & m_y & -m_l \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ m_y & -M_\lambda & -m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & l_x & l'_y \\ -m'_l & m_x & m'_y \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+l'_y+m'_l} W(l' l_x \lambda l_y; l'_y l) \begin{pmatrix} \lambda & l' & l \\ -M_\lambda & -m'_l & m_l \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{\lambda+l_x+m'_l} W(l l' l_y l'_y; \lambda l_x) \begin{pmatrix} \lambda & l' & l \\ -M_\lambda & -m'_l & m_l \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{B.12}$$

Ahora con este $(-1)^{m'_l}$ se va el mismo término de la expresión (B.10) y con este 3-j y aplicando otra vez (B.11)

$$\begin{aligned}
&\sum_{m_l m'_l \sigma} (-1)^{m_l} \begin{pmatrix} l & S_x & j_{ab} \\ m_l & \sigma & -\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda & l' & l \\ -M_\lambda & -m'_l & m_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & S_x & j'_{ab} \\ m'_l & \sigma & -\nu' \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+j'_{ab}+2S_x-\nu'} \sum_{m_l m'_l \sigma} (-1)^{j_{ab}-l'+\nu'-m_l} \begin{pmatrix} S_x & l & j_{ab} \\ \sigma & m_l & -\nu \end{pmatrix} \\
&\times \begin{pmatrix} l & \lambda & l' \\ m_l & -M_\lambda & -m'_l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j'_{ab} & S_x & l' \\ -\nu' & \sigma & m'_l \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{l+j'_{ab}+2S_x-\nu'} W(j'_{ab} S_x \lambda l; l' j_{ab}) \begin{pmatrix} \lambda & j'_{ab} & j_{ab} \\ -M_\lambda & -\nu' & \nu \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{\lambda+3S_x+l+l'-j_{ab}+j'_{ab}-\nu'} W(j_{ab} j'_{ab} l l'; \lambda S_x) \begin{pmatrix} \lambda & j'_{ab} & j_{ab} \\ -M_\lambda & -\nu' & \nu \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{B.13}$$

Otra vez con $(-1)^{-\nu'}$ se va el término $(-1)^{\nu'}$ de la expresión (B.10) y con este

3-j y aplicando (B.11)

$$\begin{aligned}
&\sum_{\nu\nu'\iota}(-1)^{\nu}\begin{pmatrix} j_{ab} & I & j \\ \nu & \iota & -\mu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda & j'_{ab} & j_{ab} \\ -M_\lambda & -\nu' & \nu \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j'_{ab} & I & j' \\ \nu' & \iota & -\mu' \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{\lambda+j+2j'+3j_{ab}+\mu'}\sum_{\nu\nu'\iota}(-1)^{j-j'_{ab}-\mu'+\nu}\begin{pmatrix} I & j_{ab} & j \\ -\iota & -\nu & \mu \end{pmatrix} \\
&\times\begin{pmatrix} j_{ab} & \lambda & j'_{ab} \\ -\nu & M_\lambda & \nu' \end{pmatrix}\begin{pmatrix} j' & I & j'_{ab} \\ \mu' & -\iota & -\nu' \end{pmatrix} \qquad \text{(B.14)} \\
&= (-1)^{\lambda+j+2j'+3j_{ab}+\mu'}W(j'I\lambda j_{ab};j'_{ab}j)\begin{pmatrix} \lambda & j' & j \\ M_\lambda & \mu' & -\mu \end{pmatrix} \\
&= (-1)^{I+2j'+3j_{ab}-j'_{ab}+\mu'}W(jj'j_{ab}j'_{ab};\lambda I)\begin{pmatrix} \lambda & j' & j \\ M_\lambda & \mu' & -\mu \end{pmatrix}.
\end{aligned}$$

De nuevo con $(-1)^{2j'+\mu'}$ se va el término $(-1)^{\mu'}$ de la expresión (B.10). Así esta ecuación (B.10) queda

$$\begin{aligned}
&\sum_{\nu\nu'\iota}\sum_{m_l m'_l\sigma}\sum_{m_y m'_y m_x}\langle j_{ab}\nu I\iota|j\mu\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota|j'\mu'\rangle\langle lm_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l'm'_l S_x\sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
&\times\langle l_x m_x l_y m_y|lm_l\rangle\langle l_x m_x l'_y m'_y|l'm'_l\rangle(-1)^{m_y}\begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ -m_y & M_\lambda & m'_y \end{pmatrix} \qquad \text{(B.15)} \\
&= (-1)^{\mu}\hat{j}\hat{j}'\begin{pmatrix} \lambda & j' & j \\ M_\lambda & \mu' & -\mu \end{pmatrix}\hat{l}\hat{l}'\hat{j}_{ab}\hat{j}'_{ab}(-1)^{l_x+l_y+l'_y+S_x-j_{ab}+j'_{ab}-I} \\
&\times W(ll'l_y l'_y;\lambda l_x)W(j_{ab}j'_{ab}ll';\lambda S_x)W(jj'j_{ab}j'_{ab};\lambda I).
\end{aligned}$$

Ahora reuniéndolo todo

$$\begin{aligned}
&\langle nj\mu|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}(\widehat{y})|n'j'\mu'\rangle = Ze\left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^{\lambda}(-1)^{\mu}\hat{j}\hat{j}'\begin{pmatrix} \lambda & j' & j \\ M_\lambda & \mu' & -\mu \end{pmatrix} \\
&\times\sum_{\beta\beta' ii'}C_n^{i\beta j}C_{n'}^{i'\beta' j'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{S_x S'_x}\hat{l}_y\hat{l}'_y\hat{l}\hat{l}'\hat{j}_{ab}\hat{j}'_{ab}(-1)^{l_x+l_y+l'_y+S_x-j_{ab}+j'_{ab}-I} \qquad \text{(B.16)} \\
&\times\begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}W(ll'l_y l'_y;\lambda l_x)W(j_{ab}j'_{ab}ll';\lambda S_x)W(jj'j_{ab}j'_{ab};\lambda I) \\
&\times\int\int(\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^{\lambda}\varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho)
\end{aligned}$$

Como

$$\begin{pmatrix} \lambda & j' & j \\ M_\lambda & \mu' & -\mu \end{pmatrix} = (-1)^{\lambda+j+j'} \begin{pmatrix} j' & \lambda & j \\ \mu' & M_\lambda & -\mu \end{pmatrix} = (-1)^{j-\mu} \frac{1}{\hat{j}} \langle j'\mu'\lambda M_\lambda | j\mu \rangle, \tag{B.17}$$

se tiene que el elemento de matriz reducido es

$$\begin{aligned} \langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle &= (-1)^{-2\lambda} \frac{\langle nj\mu|\widehat{Q}_{\lambda M_\lambda}|n'j'\mu'\rangle}{\langle j'\mu'\lambda M_\lambda|j\mu\rangle} = Z\, e \left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda (-1)^j \hat{j}' \\ &\times \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \hat{l}_y \hat{l}'_y \hat{l} \hat{l}' \hat{j}_{ab} \hat{j}'_{ab} (-1)^{l_x+l_y+l'_y+S_x-j_{ab}+j'_{ab}-I} \\ &\times \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} W(ll' l_y l'_y; \lambda l_x) W(j_{ab} j'_{ab} ll'; \lambda S_x) W(jj' j_{ab} j'_{ab}; \lambda I) \\ &\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^\lambda \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho). \end{aligned} \tag{B.18}$$

Como en este caso el core tiene espín $I = 0$ se tiene

$$W(jj' j_{ab} j'_{ab}; \lambda 0) = W(j j_{ab} j' j'_{ab}; 0\lambda) = \frac{(-1)^{j+j'-\lambda}}{\hat{j}\hat{j}'} \delta_{jj_{ab}} \delta_{j'j'_{ab}} \tag{B.19}$$

y finalmente

$$\begin{aligned} \langle nj||\widehat{Q}_\lambda||n'j'\rangle &= (-1)^{j+2j'} \hat{j}' Z\, e \left(\frac{\sqrt{ma_y}}{m_c}\right)^\lambda \\ &\times \sum_{\beta\beta' ii'} C_n^{i\beta j} C_{n'}^{i'\beta' j'} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \delta_{jj_{ab}} \delta_{j'j'_{ab}} \hat{l}_y \hat{l}'_y \hat{l} \hat{l}' (-1)^{l_x+S_x} \\ &\times \begin{pmatrix} l_y & \lambda & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} W(ll' l_y l'_y; \lambda l_x) W(jj' ll'; \lambda S_x) \\ &\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^\lambda \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho). \end{aligned} \tag{B.20}$$

B.2. Regla de suma de $B(E\lambda)$

También se pueden calcular las reglas de suma de las transiciones eléctricas desde el estado fundamental $(1,0)$ a los estados (n,j), $\sum_n B(E\lambda)_{10,nj}$, según la

ecuación

$$S_T^{SR}(E\lambda) = \sum_n B(E\lambda)_{10,nj} = \left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right) \sum_n |\langle 10||\widehat{Q}_\lambda||nj\rangle|^2$$
$$= \left(\frac{2\lambda+1}{4\pi}\right) \langle 00|j0\lambda 0\rangle^{-2} \sum_n |\langle 100|\widehat{Q}_{\lambda 0}|nj0\rangle|^2. \tag{B.21}$$

En el caso de $\lambda = 1$ los únicos estados que contribuyen son los correspondientes a $j^\pi = 1^-$ así que

$$\sum_n B(E1)_{10,n1} = \left(\frac{3}{4\pi}\right) \langle 00|1010\rangle^{-2} \sum_n |\langle 100|\widehat{Q}_{10}|n10\rangle|^2. \tag{B.22}$$

Considerando la suma sobre n se tiene

$$\sum_n |\langle 100|\widehat{Q}_{1M_1}|n10\rangle|^2 = \frac{4\pi}{3}\frac{Z^2e^2ma_y}{m_c^2} \sum_n |\langle 100|y\ Y_{10}(\widehat{y})|n10\rangle|^2$$
$$= \frac{4\pi}{3}\frac{Z^2e^2ma_y}{m_c^2} \sum_{nj\mu} \langle 100|y\ Y_{10}(\widehat{y})|nj\mu\rangle\langle nj\mu|y\ Y_{10}(\widehat{y})^*|100\rangle \tag{B.23}$$
$$= \frac{4\pi}{3}\frac{Z^2e^2ma_y}{m_c^2} \langle 100|y^2\ Y_{10}(\widehat{y})^2|100\rangle,$$

donde se ha tenido en cuenta que $Y_{10}^* = Y_{10}$. Poniendo la expresión explícita de $|100\rangle$, que corresponde a (3.11) con $n = 1, j = 0, \mu = 0$, se tiene

$$\langle 100|y^2\ Y_{10}(\widehat{y})^2|100\rangle = \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0} C_1^{i'\beta' 0} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x}$$
$$\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^2 \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho)$$
$$\times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|00\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota|00\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l' m'_l S_x\sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \tag{B.24}$$
$$\times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle\langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle$$
$$\times \int d\widehat{y}\ Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{10}(\widehat{y})^2 Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}).$$

Teniendo en cuenta la expresión

$$Y_{a\alpha} Y_{b\beta} = \frac{\hat{a}\hat{b}}{\sqrt{4\pi}} \sum_c Y_{c\gamma} \hat{c} (-1)^\gamma \begin{pmatrix} a & b & c \\ \alpha & \beta & -\gamma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b & c \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{B.25}$$

se tiene

$$
\begin{aligned}
Y_{10}^2 = \frac{3}{\sqrt{4\pi}} \Bigg[& Y_{00} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
& + \sqrt{5} Y_{20} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Bigg] \\
= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & \left[Y_{00} + \frac{2}{\sqrt{5}} Y_{20} \right].
\end{aligned}
\tag{B.26}
$$

Insertándolo en la ecuación anterior

$$
\begin{aligned}
\langle 100|y^2\, Y_{10}(\widehat{y})^2|100\rangle = & \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0} C_1^{i'\beta' 0} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \\
& \times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^2 \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\
& \times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|00\rangle \langle j'_{ab}\nu' I\iota|00\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x \sigma|j_{ab}\nu\rangle \langle l' m'_l S_x \sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
& \times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle \langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle \\
& \times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[\int d\widehat{y}\; Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{00}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) \right. \\
& \left. + \frac{2}{\sqrt{5}} \int d\widehat{y}\; Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{20}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) \right].
\end{aligned}
\tag{B.27}
$$

Teniendo en cuenta las expresiones (B.5) y (B.6) se tiene

$$
\begin{aligned}
\langle 100|y^2\, Y_{10}(\widehat{y})^2|100\rangle = & \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0} C_1^{i'\beta' 0} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \\
& \times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\, d\rho\, U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^2 \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\
& \times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|00\rangle \langle j'_{ab}\nu' I\iota|00\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x \sigma|j_{ab}\nu\rangle \langle l' m'_l S_x \sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
& \times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle \langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle (-1)^{m_y} \hat{l}_y \hat{l}'_y \\
& \times \left[\frac{1}{4\pi} \begin{pmatrix} l_y & 0 & l'_y \\ -m_y & 0 & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & 0 & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} + \frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} l_y & 2 & l'_y \\ -m_y & 0 & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & 2 & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right].
\end{aligned}
\tag{B.28}
$$

Utilizando el resultado dado por la ecuación (B.15) con $j = j' = \mu = \mu' = 0$ y $\lambda = 0$, $M_\lambda = 0$ para el primer sumando de la ecuación anterior y $\lambda = 2$, $M_\lambda = 0$

para el segundo sumando se tiene que el segundo sumando es nulo. Para el primer sumando, teniendo en cuenta las expresiones

$$W(ll'l_y l'_y; 0l_x) = \frac{(-1)^{l+l_y-l_x}}{\hat{l}\hat{l}_y}\delta_{ll'}\delta_{l_y l'_y}, \tag{B.29}$$

$$W(j_{ab}j'_{ab}ll'; 0S_x) = \frac{(-1)^{j_{ab}+l-S_x}}{\hat{j}_{ab}\hat{l}}\delta_{j_{ab}j'_{ab}}\delta_{ll'}, \tag{B.30}$$

$$W(00j_{ab}j'_{ab}; 0I) = \frac{(-1)^{j_{ab}-I}}{\hat{j}_{ab}}\delta_{j_{ab}j'_{ab}}, \tag{B.31}$$

$$\begin{pmatrix} l_y & 0 & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{l_y}}{\hat{l}_y}\delta_{l_y l'_y}, \tag{B.32}$$

queda

$$\langle 100|y^2\ Y_{10}(\hat{y})^2|100\rangle = \frac{1}{4\pi}\sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0}C_1^{i'\beta' 0}\delta_{ll'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{S_x S'_x}\delta_{j_{ab}j'_{ab}}(-1)^{2j_{ab}-2I}$$
$$\times \int\int (\text{sen}\,\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^2\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho). \tag{B.33}$$

Como el core tiene espín $I = 0$ se tiene que $j_{ab} = j = 0$ y por lo tanto $(-1)^{2j_{ab}-2I} = 1$. Reuniéndolo todo se tiene

$$S_T^{SR}(E1) = \sum_n B(E1)_{10,n1} = \frac{3}{4\pi}\frac{Z^2e^2ma_y}{m_c^2}\sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0}C_1^{i'\beta' 0}\delta_{ll'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{S_x S'_x}\delta_{j_{ab}0}\delta_{j'_{ab}0}$$
$$\times \int\int (\text{sen}\,\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^2\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho). \tag{B.34}$$

Como se puede demostrar que

$$\langle 100|y^2|100\rangle = \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0}C_1^{i'\beta' 0}\delta_{ll'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{S_x S'_x}\delta_{j_{ab}0}\delta_{j'_{ab}0}$$
$$\times \int\int (\text{sen}\,\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^2\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho), \tag{B.35}$$

se obtiene finalmente para la regla de suma de $B(E1)$

$$S_T^{SR}(E1) = \sum_n B(E1)_{10,n1} = \frac{3}{4\pi}\frac{Z^2e^2ma_y}{m_c^2}\langle 100|y^2|100\rangle. \tag{B.36}$$

En el caso de $\lambda = 2$ los únicos estados que contribuyen son los correspondientes a $j^\pi = 2^+$ así que

$$\sum_n B(E2)_{10,n2} = \left(\frac{5}{4\pi}\right) \langle 00|j020\rangle^{-2} \sum_n |\langle 100|\widehat{Q}_{20}|n20\rangle|^2. \tag{B.37}$$

Considerando de nuevo la suma sobre n se tiene

$$\begin{aligned}
&\sum_n |\langle 100|\widehat{Q}_{10}|n20\rangle|^2 = \frac{4\pi}{5}\frac{Z^2e^2m^2a_y^2}{m_c^4} \sum_n |\langle 100|y^2Y_{20}(\widehat{y})|n20\rangle|^2 \\
&= \frac{4\pi}{5}\frac{Z^2e^2m^2a_y^2}{m_c^4} \sum_{nj\mu} \langle 100|y^2Y_{20}(\widehat{y})|nj\mu\rangle\langle nj\mu|y^2Y_{20}(\widehat{y})^*|100\rangle \\
&= \frac{4\pi}{5}\frac{Z^2e^2m^2a_y^2}{m_c^4} \langle 100|y^4Y_{20}(\widehat{y})^2|100\rangle,
\end{aligned} \tag{B.38}$$

donde se ha tenido en cuenta de nuevo que $Y_{20}^* = Y_{20}$. Poniendo de nuevo la expresión explícita de $|100\rangle$ se tiene

$$\begin{aligned}
&\langle 100|y^4\ Y_{20}(\widehat{y})^2|100\rangle = \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0} C_1^{i'\beta' 0} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \\
&\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^4 \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\
&\times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|00\rangle\langle j'_{ab}\nu' I\iota|00\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x\sigma|j_{ab}\nu\rangle\langle l' m'_l S_x\sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
&\times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle\langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle \\
&\times \int d\widehat{y}\ Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{20}(\widehat{y})^2 Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}).
\end{aligned} \tag{B.39}$$

Teniendo en cuenta la expresión (B.25) se tiene

$$\begin{aligned}
Y_{20}^2 = \frac{5}{\sqrt{4\pi}} \Bigg[& Y_{00} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
& + \sqrt{5} Y_{20} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
& + \sqrt{9} Y_{40} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 2 & 4 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \Bigg] \\
= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} & \left[Y_{00} + \frac{2\sqrt{5}}{3} Y_{20} + \frac{2\sqrt{9}}{7} Y_{40} \right].
\end{aligned} \tag{B.40}$$

Insertándolo en la ecuación anterior

$$\begin{aligned}
\langle 100|y^4\ Y_{20}(\widehat{y})^2|100\rangle &= \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0} C_1^{i'\beta' 0} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \\
&\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta 0}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^4 \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta' 0}^{THO}(\rho) \\
&\times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|00\rangle \langle j'_{ab}\nu' I\iota|00\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x \sigma|j_{ab}\nu\rangle \langle l' m'_l S_x \sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
&\times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle \langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle \\
&\times \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \left[\int d\widehat{y}\ Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{00}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) \right. \\
&+ \frac{2\sqrt{5}}{3} \int d\widehat{y}\ Y_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{20}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) \\
&+ \left. \frac{2\sqrt{9}}{7} \int d\widehat{y}\ dY_{l_y m_y}(\widehat{y})^* Y_{40}(\widehat{y}) Y_{l'_y m'_y}(\widehat{y}) \right].
\end{aligned} \tag{B.41}$$

Teniendo en cuenta la expresiones (B.5) y (B.6) se tiene

$$\begin{aligned}
\langle 100|y^4\ Y_{20}(\widehat{y})^2|100\rangle &= \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0} C_1^{i'\beta' 0} \delta_{l_x l'_x} \delta_{S_x S'_x} \\
&\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2 (\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho) \varphi_K^{l_x l_y}(\alpha) y^4 \varphi_{K'}^{l_x l'_y}(\alpha) U_{i'\beta'}^{THO}(\rho) \\
&\times \sum_{\nu\nu'\iota} \langle j_{ab}\nu I\iota|00\rangle \langle j'_{ab}\nu' I\iota|00\rangle \sum_{m_l m'_l \sigma} \langle l m_l S_x \sigma|j_{ab}\nu\rangle \langle l' m'_l S_x \sigma|j'_{ab}\nu'\rangle \\
&\times \sum_{m_y m'_y m_x} \langle l_x m_x l_y m_y|l m_l\rangle \langle l_x m_x l'_y m'_y|l' m'_l\rangle (-1)^{m_y} \hat{l}_y \hat{l}'_y \\
&\times \left[\frac{1}{4\pi} \begin{pmatrix} l_y & 0 & l'_y \\ -m_y & 0 & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & 0 & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right. \\
&+ \frac{5}{3}\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} l_y & 2 & l'_y \\ -m_y & 0 & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & 2 & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
&+ \left. \frac{9}{7}\frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} l_y & 4 & l'_y \\ -m_y & 0 & m'_y \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_y & 4 & l'_y \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \right].
\end{aligned} \tag{B.42}$$

Utilizando de nuevo el resultado dado por la ecuación (B.15) con $j = j' = \mu = \mu' = 0$ y $\lambda = 0$, $M_\lambda = 0$ para el primer sumando de la ecuación anterior, $\lambda = 2$, $M_\lambda = 0$ para el segundo sumando y $\lambda = 4$, $M_\lambda = 0$ para el tercer sumando se tiene que el segundo y tercer sumandos son nulos. Para el primer sumando,

teniendo en cuenta otra vez las ecuaciones (B.29) - (B.32), queda

$$\langle 100|y^4\ Y_{20}(\widehat{y})^2|100\rangle = \frac{1}{4\pi}\sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0}C_1^{i'\beta' 0}\delta_{ll'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{S_x S'_x}\delta_{j_{ab}j'_{ab}}(-1)^{2j_{ab}-2I}$$
$$\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^4\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho). \tag{B.43}$$

De nuevo, como el core tiene espín $I = 0$ se tiene que $j_{ab} = j = 0$ y por lo tanto $(-1)^{2j_{ab}-2I} = 1$. Reuniéndolo todo se tiene

$$S_T^{SR}(E2) = \sum_n B(E2)_{10,n2} = \frac{5}{4\pi}\frac{Z^2e^2m^2a_y^2}{m_c^4}\sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0}C_1^{i'\beta' 0}\delta_{ll'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{S_x S'_x}\delta_{j_{ab}0}\delta_{j'_{ab}0}$$
$$\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^4\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho). \tag{B.44}$$

Como se puede demostrar que

$$\langle 100|y^4|100\rangle = \sum_{\beta\beta' ii'} C_1^{i\beta 0}C_1^{i'\beta' 0}\delta_{ll'}\delta_{l_x l'_x}\delta_{l_y l'_y}\delta_{S_x S'_x}\delta_{j_{ab}0}\delta_{j'_{ab}0}$$
$$\times \int\int (\operatorname{sen}\alpha)^2(\cos\alpha)^2 d\alpha\ d\rho\ U_{i\beta}^{THO}(\rho)\varphi_K^{l_x l_y}(\alpha)y^4\varphi_{K'}^{l_x l_y}(\alpha)U_{i'\beta'}^{THO}(\rho), \tag{B.45}$$

se obtiene finalmente para la regla de suma de $B(E2)$

$$S_T^{SR}(E2) = \sum_n B(E2)_{10,n2} = \frac{5}{4\pi}\frac{Z^2e^2m^2a_y^2}{m_c^4}\langle 100|y^4|100\rangle. \tag{B.46}$$

Apéndice C

Programa FaCE

El programa FaCE (Faddeev with Core Excitation) es un programa autocontenido que resuelve las ecuaciones de Faddeev [39] para un problema de tres cuerpos. Permite incluir la excitación de uno de los tres cuerpos, mientras los otros dos permanecen inertes. Es especialmente útil para obtener las energías de ligadura y la composición estructural de los estados ligados de núcleos exóticos tratados como sistemas de tres cuerpos, dadas las tres interacciones a dos cuerpos efectivas. Se puede definir una gran variedad de estas interacciones y se pueden calcular transformaciones supersimétricas de estos potenciales cuando se necesitan extraer estados de dos cuerpos debido al bloqueo de Pauli.

No obstante, el programa también puede resolver simplemente la ecuación de Schrödinger en coordenadas hiperesféricas en uno de los sistemas de Jacobi (ver subapartado A.1 del apéndice A). Ésta es la opción que se ha utilizado en este trabajo, tomando el sistema de Jacobi **T**, en el cual las dos partículas fuera del core están relacionados por la coordenada $\vec{x}$.

C.1. La base de tres cuerpos

FaCE resuelve las ecuaciones de Faddeev con una formulación hiperesférica para un problema general de tres cuerpos [14,149,150]. Las ecuaciones de Faddeev definen tres funciones de onda $\psi_k^{j\mu}$ con $\{k = 1, 2, 3\}$, tales que la función de onda completa de tres cuerpos con momento angular total j es

$$\psi^{j\mu} = \psi_1^{j\mu}(\vec{x}_1, \vec{y}_1) + \psi_2^{j\mu}(\vec{x}_2, \vec{y}_2) + \psi_3^{j\mu}(\vec{x}_3, \vec{y}_3), \tag{C.1}$$

donde $\{\vec{x}_k, \vec{y}_k\}$ son las coordenadas de Jacobi. Aquí, las componentes $\psi_k^{j\mu}$ son funciones del par k de coordenadas de Jacobi y son soluciones de las ecuaciones de Faddeev acopladas

$$\begin{aligned}(\widehat{T}_1 + \widehat{h} + \widehat{V}_1 - \varepsilon)\psi_1^{j\mu} &= -\widehat{V}_1(\psi_2^{j\mu} + \psi_3^{j\mu}),\\ (\widehat{T}_2 + \widehat{h} + \widehat{V}_2 - \varepsilon)\psi_2^{j\mu} &= -\widehat{V}_2(\psi_3^{j\mu} + \psi_1^{j\mu}),\\ (\widehat{T}_3 + \widehat{h} + \widehat{V}_3 - \varepsilon)\psi_3^{j\mu} &= -\widehat{V}_3(\psi_3^{j\mu} + \psi_2^{j\mu}).\end{aligned} \tag{C.2}$$

En estas ecuaciones se tiene que $\widehat{h} = \sum_k \widehat{h}_k$ es la suma de los hamiltonianos intrínsecos de cada partícula $\widehat{h}_k$, $\widehat{T}_k = \widehat{T}_{x_k} + \widehat{T}_{y_k}$ es la energía cinética relativa en cada coordenada y $\widehat{V}_k = \widehat{V}_{pq}(r_{pq})$ es la interacción (coulombiana y nuclear) a dos cuerpos entre la pareja correspondiente. Los índices (k, p, q) van como $(1, 2, 3)$ en orden circular. Se usará $\mathbf{X}$ para referirse al par $\{\vec{x}_1, \vec{y}_1\}$, $\mathbf{Y}$ para el par $\{\vec{x}_2, \vec{y}_2\}$ y $\mathbf{T}$ para $\{\vec{x}_3, \vec{y}_3\}$.

FaCE permite al usuario incluir la excitación de una de las partículas. Se supone que una partícula $c \in (1, 2, 3)$ tiene estados excitados de baja energía acoplados fuertemente al estado fundamental y que van a tener un papel importante en el sistema de tres cuerpos. En ese caso, la partícula c se trata como el core y sus coordenadas internas $\widehat{\xi}_c$ tienen que ser añadidas al conjunto de coordenadas de Jacobi para definir el estado cuántico completo del sistema. El hamiltoniano intrínseco del core determina un conjunto de autoestados ϕ_{s_c} y autovalores ε_{s_c},

$$\widehat{h}_c(\widehat{\xi}_c)\phi_{s_c}(\widehat{\xi}_c) = \varepsilon_{s_c}\phi_{s_c}(\widehat{\xi}_c). \tag{C.3}$$

El modelo desarrolla la función de onda total del sistema en términos de estos estados ϕ_{s_c} y factoriza los grados de libertad del core de las coordenadas de Jacobi en cada componente de Faddeev,

$$\psi_k^{j\mu}(\vec{x}_k, \vec{y}_k, \widehat{\xi}_c) = \sum_{s_c} \phi_{s_c}(\widehat{\xi}_c)\psi_{s_c}(\vec{x}_k, \vec{y}_k). \tag{C.4}$$

Aquí ψ_{s_c} contiene la parte radial, angular y de espín de las dos partículas restantes relativas al core elegido. Este modelo es ventajoso si sólo se requiere un número pequeño de estados del core para describir el sistema con precisión, lo cual es normalmente cierto para sistemas próximos a las líneas de evaporación.

La transformación desde un conjunto de coordenadas de Jacobi a un sistema de coordenadas hiperesféricas no afecta a las variables angulares y de espín, ni a

los grados de libertad del core. La dependencia con el isospín no se introduce explícitamente porque típicamente las interacciones que se usarán tienen un isospín fijo. Para cada conjunto de coordenadas de Jacobi $\{\vec{x}_k, \vec{y}_k\}$, se necesita definir una pareja de momentos angulares orbitales asociados $\{l_{xk}, l_{yk}\}$, así como los estados y los espines de las tres partículas s_k, s_p, s_q. El core tiene en FaCE un índice para sus diferentes estados excitados pero para la presentación se supondrá que el valor del espín s_c es suficiente para identificar su estado. Si $|k : j\mu\rangle$ es el ket que denota la función de onda $\psi_k^{j\mu}(\vec{x}_k, \vec{y}_k)$, la descomposición para cada componente de Faddeev sigue el siguiente orden de acoplamiento,

$$|k : j\mu\rangle = \sum_{\beta_k} |k : \beta_k j; \beta_k j\mu\rangle \equiv \sum_{\beta_k} |k : \beta_k j\rangle \otimes |k : \beta_k j\mu\rangle, \tag{C.5}$$

con la abreviatura $\beta_k \equiv \{K_k, ((l_{xk}, l_{yk})l_k, (s_p, s_q)S_{xk})\, j_{abk}, s_k\}$ para los números cuánticos de cada componente k, donde K es el momento hiperangular (ver subapartado A.2 del apéndice A). Uno de los espines del conjunto $\{s_k, s_p, s_q\}$ en β_k identificará el estado excitable del core s_c. Aquí el ket $|k : \beta_k j\rangle$ representa el estado que caracteriza el grado de libertad de la variable hiperradial mientras $|k : \beta_k j\mu\rangle$ representa el estado que caracteriza los grados de libertad de las variables hiperangular, angulares y de espín.

Introduciendo el desarrollo (C.5) en las ecuaciones de Faddeev (C.1), se obtiene un conjunto de ecuaciones acopladas para las funciones de onda $U_{\beta_k}^{kj}(\rho)$ que son representadas por el ket $|k : \beta_k j\rangle$

$$(T_\rho + L_{K_k}(\rho) - \varepsilon)U_{\beta_k}^{kj}(\rho) + \sum_{p\beta_p} V_{\beta_k\beta_p}^{kpj}(\rho)U_{\beta_p}^{pj}(\rho) = 0, \tag{C.6}$$

donde $T_\rho = -\frac{\hbar}{2m}\frac{d^2}{d\rho^2}$ y $L_{K_k}(\rho) = \hbar^2(K_k + 3/2)(K_k + 5/2)/(2m\rho^2)$ es el potencial centrífugo. Los acoplamientos $V_{\beta_k\beta_p}^{kpj}(\rho)$ son los elementos de matriz $V_{\beta_k\beta_p}^{kpj}(\rho) = \langle p : \beta_p j\mu|\widehat{V}_{kp}|k : \beta_k j\mu\rangle$. La parte hiperangular se realiza mediante cuadratura de Gauss-Jacobi.

La parte hiperradial se desarrolla en términos de una base ortonormal de funciones

$$\chi_i(\rho) = \rho^{5/2}\rho_0^{-3}\left[i!(i+5)!\right]^{1/2} L_i^5(z)\exp(-z/2), \tag{C.7}$$

donde $z = \rho/\rho_0$, con el factor de escala ρ_0, y $L_i^A(z)$ es un polinomio generalizado de Laguerre. El desarrollo es de la forma siguiente

$$U_{\beta_k}^{kj}(\rho) = \sum_{i=0}^{n_b} a_{\beta_k}^{kij}\chi_i(\rho), \tag{C.8}$$

donde n_b es el número de excitaciones hiperradiales.

Las integrales de los elementos de matriz del potencial de las funciones $\chi_i(\rho)$ se calculan usando la cuadratura de Gauss-Laguerre ($\mathcal{A} = 5$) con n_{lag} puntos, cuyo número debe ser mucho mayor que el número n_b de la base de polinomios. Los elementos de matriz de la energía cinética, incluyendo la barrera centrífuga, son

$$\int_0^\infty d\rho\, \chi_i(\rho) T_{K_k}(\rho) \chi_{i'}(\rho) = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{1}{2} - \frac{\delta_{ii'}}{4} + \frac{i_<}{6} + \frac{K_k(K_k+4)}{120}\left(5(i_> - i_< + 1) + i_> + i_< + 1\right)\right] \tag{C.9}$$

donde $i_< = \min(i, i')$ y $i_> = \max(i, i')$.

Introduciendo los desarrollos (C.5) y (C.8) en las ecuaciones de Faddeev acopladas (C.1), se llega a un conjunto de ecuaciones lineales simultáneas

$$H\mathbf{a} = \varepsilon\mathbf{a} \tag{C.10}$$

para los coeficientes $\mathbf{a} \equiv \{a\}$. Se calcularán sólo los estados ligados o pseudoligados que se anulen tanto en $\rho = 0$ como para $\rho \to \infty$. Esto está garantizado por las propiedades de la base de funciones hiperradiales utilizada.

C.2. Elementos de matriz

El estado completo en notación bra-ket para un valor dado del momento angular total j es, según la ecuación C.5,

$$|j\mu\rangle = \sum_{k=1}^{3} \sum_{\beta_k} |k : \beta_k j; \beta_k j\mu\rangle. \tag{C.11}$$

Por lo tanto los elementos de matriz del hamiltoniano necesitarán integrales de solapamiento entre pares de la base sobrecompleta $\{|k : \beta_k j\mu\rangle\}$. Para ello, se necesitarán las matrices de transformación para las rotaciones $|q : \beta_q j\mu\rangle \to |k : \beta_k j\mu\rangle$ en el sentido horario y $|k : \beta_k j\mu\rangle \leftarrow |p : \beta_p j\mu\rangle$ en el sentido antihorario, entre las tres componentes de Faddeev como se muestra en la figura C.1. Considerando (k, p, q) en orden circular, las expresiones que permiten la transformación entre

las componentes de Faddeev en ambas direcciones son

$$|k:\beta_k j\mu\rangle = \sum_{K_q}\sum_{l_{xq}l_{yq}}\sum_{l_q S_{xq}}\sum_{j_{abq}}\sum_{S_t}(-1)^{2(j-S_{xq}-s_q)+S_t+S_{xk}-s_k}\hat{S}_t^2\hat{S}_{xq}\hat{S}_{xk}\hat{j}_{abq}\hat{j}_{abk}$$
$$\times W(l_k S_{xk} j s_k; j_{abk} S_t) W(s_q s_p S_t s_k; S_{xk} S_{xq}) W(s_q S_{xq} j l_q; S_t j_{abq})$$
$$\times \langle l_{xk} l_{yk}|l_{xq} l_{yq}\rangle_{l_q K_q}\delta_{K_k K_q}\delta_{l_k l_q}|q:\beta_q j\mu\rangle, \tag{C.12}$$

$$|k:\beta_k j\mu\rangle = \sum_{K_p}\sum_{l_{xp}l_{yp}}\sum_{l_p S_{xp}}\sum_{j_{abp}}\sum_{S_t}(-1)^{2(j-S_{xp}-s_p)+S_t-S_{xp}-s_p}\hat{S}_t^2\hat{S}_{xp}\hat{S}_{xk}\hat{j}_{abp}\hat{j}_{abk}$$
$$\times W(l_k S_{xk} j s_k; j_{abk} S_t) W(s_p s_q S_t s_k; S_{xk} S_{xp}) W(s_p S_{xp} j l_p; S_t j_{abp})$$
$$\times \langle l_{xk} l_{yk}|l_{xp} l_{yp}\rangle_{l_p K_p}\delta_{K_k K_p}\delta_{l_k l_p}|p:\beta_p j\mu\rangle, \tag{C.13}$$

donde $\langle l_{xk}l_{yk}|l_{xp}l_{yp}\rangle_{l_pK_p}$ son los coeficientes de Raynal-Revai [148] y S_t es el espín total. Las ecuaciones (C.12) y (C.13) introducen dos tipos de matrices $\tilde{N}_{\beta_k\beta_q}$ y $N_{\beta_k\beta_p}$ tal que $|k:\beta_k j\mu\rangle = \sum_{\beta_q}\tilde{N}_{\beta_k\beta_q}|q:\beta_q j\mu\rangle$ y $|k:\beta_k j\mu\rangle = \sum_{\beta_p}N_{\beta_k\beta_p}|p:\beta_p j\mu\rangle$. Esto es, los elementos de matriz de $N_{\beta_k\beta_p}$ son los solapamientos de los estados de la base

$$N_{\beta_k\beta_p} = \langle p:\beta_p j\mu|k:\beta_k j\mu\rangle, \tag{C.14}$$

así que $\sum_{\beta_p}N_{\beta_k\beta_p}N_{\beta_p\beta_q} = \tilde{N}_{\beta_k\beta_q}$. Además se puede observar cómo estas matrices de transformación conservan el momento hiperangular K y el momento angular orbital total l.

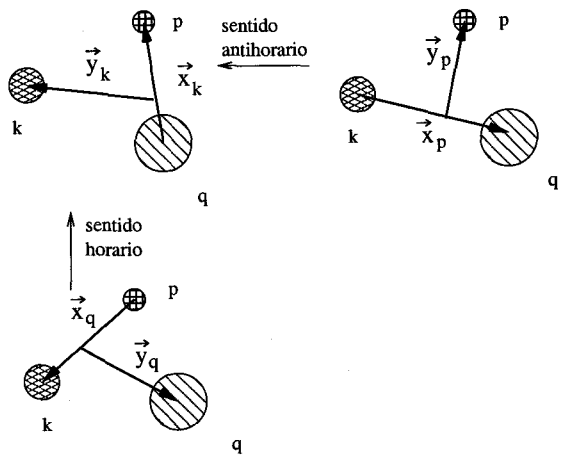


Figura C.1: *Sistemas de Jacobi.*

Hay varios tipos de elementos de matriz que se necesitan para la matriz del hamiltoniano en las ecuaciones de Faddeev dada por (C.10). El potencial general que se considera es

$$\widehat{V}_{pq} = \widehat{V}_k(x_k) = V_i^c(x_k) + \widehat{SO}V_k^{SO}(x_k) + \widehat{Q}V_k^Q(x_k) + \widehat{T}V_k^T(x_k) + \widehat{SS}V_k^{SS}, \quad \text{(C.15)}$$

donde $V_k^c(x_i)$ representa la interacción central, $\widehat{SO}$ y $V_k^{SO}(x_k)$ son el operador espín-órbita y el factor de forma radial espín-órbita, $\widehat{Q}$ y $V_k^Q(x_k)$ son el operador tensorial y la forma radial para los multipolos del potencial deformado, $\widehat{T}$ y $V_k^T(x_k)$ representan el operador tensorial estándar y la dependencia radial para el tensor interacción nn y finalmente $\widehat{SS}$ y V_k^{SS} son el operador espín-espín y el correspondiente factor de forma. Todo esto esta incluido en FaCE.

Los elementos de matriz de $\widehat{V}_k(x_k)$ son calculados preferentemente entre estados de la misma componente k. Los elementos de matriz $N_{\beta_k\beta_p}$ permiten expresar los elementos de matriz del potencial en representaciones mezcladas, en términos de la representación de Faddeev preferencial. Por ejemplo

$$\langle p : \beta_p' j || \widehat{V}_k || k : \beta_k j \rangle = \sum_{\beta_k'} N_{\beta_k'\beta_p'} \langle k : \beta_k' j || \widehat{V}_k || k : \beta_k j \rangle, \quad \text{(C.16)}$$

o para los casos en que el potencial es mas fácilmente representado en un conjunto particular de coordenadas de Jacobi

$$\langle p : \beta_p' j || \widehat{V}_k || p : \beta_p j \rangle = \sum_{\beta_k'\beta_k} N_{\beta_k'\beta_p'} \langle k : \beta_k' j || \widehat{V}_k || k : \beta_k j \rangle N_{\beta_k\beta_p}. \quad \text{(C.17)}$$

Primero se consideran los elementos de matriz angulares y de espín y éstos serán más tarde multiplicados por integrales numéricas sobre el hiperradio ρ y el hiperángulo α_k. Para ello conviene definir $|k : \gamma_k j\mu\rangle$ de la forma siguiente

$$|k : \beta_k j\mu\rangle = |k : K_k l_{xk} l_{yk}; \gamma_k j\mu\rangle \equiv |k : K_k l_{xk} l_{yk}\rangle \otimes |k : \gamma_k j\mu\rangle, \quad \text{(C.18)}$$

donde $\gamma_k \equiv \{((l_{xk}, l_{yk})l_k, (s_p, s_q)S_{xk})\, j_{abk}, s_k\}$. Aquí el ket $|k : K_k l_{xk} l_{yk}\rangle$ representa el estado que caracteriza el grado de libertad de la variable hiperangular, denotando la función $\varphi_{K_k}^{l_{xk}l_{yk}}(\alpha_k)$ que viene dada por la ecuación (A.27), y el ket $|k : \gamma_k j\mu\rangle$ representa el estado que caracteriza los grados de libertad de las variables angulares y de espín. Para denotar a los elementos de matriz en la base de estados $|k : \gamma_k j\mu\rangle$ se va a usar $W_{kk'}$. Así se tendrá

$$\begin{aligned}\langle k : \gamma_k' j || \widehat{V}_k || k : \gamma_k j \rangle = {} & W_{kk'}^c V_k^c(x_k) + W_{kk'}^{SO} V_k^{SO}(x_k) + W_{kk'}^Q V_k^Q(x_k) \\ & + W_{kk'}^T V_k^T(x_k) + W_{kk'}^{SS} V_k^{SS}.\end{aligned} \quad \text{(C.19)}$$

El elemento de matriz del potencial para la parte central es diagonal en todas las variables angulares y de espín. Lo siguiente es considerar la parte espín-órbita. Como las tres partículas pueden tener espín, se introduce un operador general de espín $\widehat{\Sigma}_k \equiv \Gamma_{kp}\widehat{s}_p + \Gamma_{kq}\widehat{s}_q$ donde Γ_{kp} y Γ_{kq} seleccionan cual de los espines va a estar dinámicamente acoplado y con que intensidad relativa. Los elementos de matriz para este operador son

$$\begin{aligned}
&\langle k:\gamma'_k j||\widehat{l}_{xk}\cdot\widehat{\Sigma}_k||k:\gamma_k j\rangle = \delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_p s_p}\delta_{s'_q s_q}\delta_{j_{abk}j'_{abk}}\delta_{l'_{yk}l_{yk}}\delta_{l'_{xk}l_{xk}}\\
&\times(-1)^{2j+3j'_{abk}+l_{yk}+l'_{xk}+2s_k+s_p+s_q}\hat{S}'_{xk}\hat{S}_{xk}\hat{l}'_k\hat{l}_k\hat{l}_{xk}\sqrt{l_{xk}(l_{xk}+1)}\\
&\times\left\{\begin{array}{ccc} l'_k & l_k & 1\\ S_{xk} & S'_{xk} & j_{abk}\end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} l'_k & l_k & 1\\ l_{xk} & l'_{xk} & l'_{yk}\end{array}\right\}\\
&\times\left[\Gamma_{kp}(-1)^{S_{xk}}\hat{s}_p\sqrt{s_p(s_p+1)}\left\{\begin{array}{ccc} S'_{xk} & S_{xk} & 1\\ s_p & s'_p & s'_q\end{array}\right\}\right.\\
&\left.+\,\Gamma_{kq}(-1)^{S'_{xk}}\hat{S}_q\sqrt{s_q(s_q+1)}\left\{\begin{array}{ccc} S'_{xk} & S_{xk} & 1\\ s_q & s'_q & s'_p\end{array}\right\}\right].
\end{aligned}\tag{C.20}$$

Típicamente la interacción entre un núcleo excitable deformado y otra partícula se desarrolla en multipolos. El operador momento angular esencial es una interacción tensorial del tipo $C_Q(\widehat{l}_x)\cdot C_Q(\widehat{s})$. Dependiendo de la componente de Faddeev y el subíndice que especifica el núcleo deformado, se necesitan todas las formas del operador: a) $C_Q(\widehat{l}_{xk})\cdot C_Q(\widehat{s}_k)$, b) $C_Q(\widehat{l}_{xk})\cdot C_Q(\widehat{s}_p)$ y c) $C_Q(\widehat{l}_{xk})\cdot C_Q(\widehat{s}_q)$. A continuación se presentan los resultados para estos elementos de matriz:

$$\begin{aligned}
&\text{a})\langle k:\gamma'_k j||C_Q(\widehat{l}_{xk})\cdot C_Q(\widehat{s}_k)||k:\gamma_k j\rangle = \delta_{s'_p s_p}\delta_{s'_q s_q}\delta_{l'_{yk}l_{yk}}\delta_{S'_{xk}S_{xk}}\\
&\times(-1)^{j+2j_{abk}+l'_{yk}+l'_k+l_k+s'_k+S'_{xk}}\hat{j}'_{abk}\hat{j}_{abk}\hat{l}'_k\hat{l}_k\hat{l}'_{xk}\hat{l}_{xk}\hat{s}'_k\begin{pmatrix} l'_{xk} & Q & l_{xk}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\\
&\times\left\{\begin{array}{ccc} j'_{abk} & j_{abk} & Q\\ s_k & s'_k & j\end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} j'_{abk} & j_{abk} & Q\\ l_k & l'_k & S'_{xk}\end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} l'_k & l_k & Q\\ l_{xk} & l'_{xk} & l'_{yk}\end{array}\right\}\langle s'_k||C_Q(\widehat{s}_k)||s_k\rangle;
\end{aligned}\tag{C.21}$$

$$\begin{aligned}
\text{b})\langle k:\gamma'_k j||C_Q(\widehat{l}_{xk})\cdot C_Q(\widehat{s}_p)||k:\gamma_k j\rangle &= \delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_q s_q}\delta_{l'_{yk} l_{yk}}\delta_{j'_{abk} j_{abk}} \\
\times (-1)^{j+l'_{yk}+S'_{xk}+S_{xk}+s'_q+s'_p}\hat{l}'_k\hat{l}_k\hat{S}'_{xk}\hat{S}_{xk}\hat{l}'_{xk}\hat{l}_{xk}\hat{s}'_p &\begin{pmatrix} l'_{xk} & Q & l_{xk} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\times \begin{Bmatrix} l'_k & l_k & Q \\ S_{xk} & S'_{xk} & j'_{abk} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l'_k & l_k & Q \\ l_{xk} & l'_{xk} & l'_{yk} \end{Bmatrix}&\begin{Bmatrix} S'_{xk} & S_{xk} & Q \\ s_p & s'_p & s_q \end{Bmatrix}\langle s'_p||C_Q(\widehat{s}_p)||s_p\rangle;
\end{aligned} \tag{C.22}$$

$$\begin{aligned}
\text{c})\langle k:\gamma'_k j||C_Q(\widehat{l}_{xk})\cdot C_Q(\widehat{s}_q)||k:\gamma_k j\rangle &= \delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_p s_p}\delta_{l'_{yk} l_{yk}}\delta_{j'_{abk} j_{abk}} \\
\times (-1)^{j+l'_{yk}+S'_{xk}+S_{xk}+s'_q+s'_p}\hat{l}'_k\hat{l}_k\hat{S}'_{xk}\hat{S}_{xk}\hat{l}'_{xk}\hat{l}_{xk}\hat{s}'_q &\begin{pmatrix} l'_{xk} & Q & l_{xk} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\
\times \begin{Bmatrix} l'_k & l_k & Q \\ S_{xk} & S'_{xk} & j'_{abk} \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} l'_k & l_k & Q \\ l_{xk} & l'_{xk} & l'_{yk} \end{Bmatrix}&\begin{Bmatrix} S'_{xk} & S_{xk} & Q \\ s_q & s'_q & s'_p \end{Bmatrix}\langle s'_q||C_Q(\widehat{s}_q)||s_q\rangle.
\end{aligned} \tag{C.23}$$

Los elementos de matriz entre los diferentes estados del core $\langle s_{k'}||C_Q(\widehat{s}_k)||s_k\rangle$ dependen del modelo usado. Bajo la suposición de un modelo puramente rotacional, estos elementos de matriz vienen dados por

$$\langle s_{k'}||C_Q(\widehat{s}_k)||s_k\rangle = (-1)^{K-s'_k}\hat{s}_k\begin{pmatrix} s'_k & Q & s_k \\ -K' & 0 & K \end{pmatrix}, \tag{C.24}$$

donde K es el número cuántico para la banda rotacional.

Cuando se consideran las interacciones espín-espín otra vez hay tres posibilidades dependiendo de las componentes de Faddeev: a) $\langle s'_k||\widehat{s}_k\cdot\widehat{s}_p||s_k\rangle$, b) $\langle s'_k||\widehat{s}_k\cdot\widehat{s}_q||s_k\rangle$ y c) $\langle s'_k||\widehat{s}_p\cdot\widehat{s}_q||s_k\rangle$. Después de algo de álgebra se llega a:

$$\begin{aligned}
\text{a})\langle k:\gamma'_k j||\widehat{s}_k\cdot\widehat{s}_p||k:\gamma_k j\rangle &= \delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_p s_p}\delta_{s'_q s_q}\delta_{l'_k l_k}(-1)^{3j+j'_{abk}-j_{abk}+l'_k+2S_{xk}-s_k+s_p+s_q} \\
\times \hat{j}'_{abk}\hat{j}_{abk}\hat{S}'_{xk}\hat{S}_{xk}\hat{s}_k\hat{s}_p&\sqrt{s_k(s_k+1)}\sqrt{s_p(s_p+1)} \\
\times \begin{Bmatrix} j'_{abk} & j_{abk} & 1 \\ S_{xk} & S'_{xk} & l'_k \end{Bmatrix}\begin{Bmatrix} S'_{xk} & S_{xk} & 1 \\ s_p & s'_p & s'_q \end{Bmatrix}&\begin{Bmatrix} s'_k & s_k & 1 \\ j_{abk} & j'_{abk} & j \end{Bmatrix};
\end{aligned} \tag{C.25}$$

$$\text{b)}\langle k:\gamma'_k j||\widehat{s}_k\cdot\widehat{s}_q||k:\gamma_k j\rangle=\delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_p s_p}\delta_{s'_q s_q}\delta_{l'_k l_k}(-1)^{3j+j'_{abk}-j_{abk}+l'_k+S_{xk}+S'xk-s'_k+s'_p+s_q}$$
$$\times\hat{j}'_{abk}\hat{j}_{abk}\hat{S}'_{xk}\hat{S}_{xk}\hat{s}_k\hat{s}_q\sqrt{s_k(s_k+1)}\sqrt{s_q(s_q+1)}$$
$$\times\left\{\begin{array}{ccc} j'_{abk} & j_{abk} & 1\\ S_{xk} & S'_{xk} & l'_k\end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} S'_{xk} & S_{xk} & 1\\ s_q & s'_q & s'_p\end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} s'_k & s_k & 1\\ j_{abk} & j'_{abk} & j\end{array}\right\};\tag{C.26}$$

$$\text{c)}\langle k:\gamma'_k j||\widehat{s}_p\cdot\widehat{s}_q||k:\gamma_k j\rangle=\delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_p s_p}\delta_{s'_q s_q}\delta_{j_{abk}j'_{abk}}\delta_{S_{xk}S'_{xk}}\delta_{l'_k l_k}(-1)^{S_{xk}+s_p+s_q}\hat{s}_p\hat{s}_q$$
$$\times\sqrt{s_p(s_p+1)}\sqrt{s_q(s_q+1)}\left\{\begin{array}{ccc} s'_p & s_p & 1\\ s_q & s'_q & S'_{xk}\end{array}\right\}.\tag{C.27}$$

Una fuerza realista *nn* contiene una interacción tensorial del tipo $T_2(\widehat{s}_p\widehat{s}_q)\cdot C_2(\widehat{l}_{xk})$ que también necesita ser considerada. Después de trabajo de álgebra la expresión final es

$$\langle k:\gamma'_k j||T_2(\widehat{s}_p\widehat{s}_q)\cdot C_2(\widehat{l}_{xk})||k:\gamma_k j\rangle=\delta_{s'_k s_k}\delta_{s'_p s_p}\delta_{s'_q s_q}\delta_{j'_{abk}j_{abk}}\delta_{l'_{yk}l_{yk}}$$
$$\times(-1)^{3j_{abk}+l_{yk}-S'xk}\hat{2}\hat{S}'_{xk}\hat{S}_{xk}\hat{l}'_k\hat{l}_k\hat{l}_{xk}\hat{l}'_{xk}\hat{s}'_p\hat{s}'_q\sqrt{s_p(s_p+1)}\sqrt{s_q(s_q+1)}$$
$$\times\left\{\begin{array}{ccc} S'_{xk} & S_{xk} & 2\\ l_k & l'_k & j'_{abk}\end{array}\right\}\left\{\begin{array}{ccc} l'_k & l_k & 2\\ l_{xk} & l'_{xk} & l'_{yk}\end{array}\right\}\left(\begin{array}{ccc} l'_{xk} & 2 & l_{xk}\\ 0 & 0 & 0\end{array}\right)\left\{\begin{array}{ccc} S'_{xk} & S_{xk} & 2\\ s'_p & s_p & 1\\ s'_q & s_q & 1\end{array}\right\}.\tag{C.28}$$

Los modelos de pocos cuerpos incluyen con frecuencia potenciales efectivos de tres cuerpos para describir la influencia de la dinámica no explícitamente descrita por los potenciales de dos cuerpos. En FaCE se parametriza la forma diagonal más simple para tal potencial

$$\langle k':\gamma'_k j||\widehat{V}_3||k:\gamma_k j\rangle=\delta_{kk'}\delta_{\gamma'_k\gamma_k}V_3(\rho).\tag{C.29}$$

C.3. Estados prohibidos de Pauli

Con frecuencia dentro de un cálculo de tres cuerpos, es necesario eliminar los estados ligados de dos cuerpos antes de la diagonalización. Este se puede realizar

mediante varios métodos [46, 52], entre los cuales uno usa operadores de proyección insertados en el hamiltoniano de tres cuerpos antes de la diagonalización y otro cambia los potenciales a dos cuerpos en los canales con estados prohibidos ligados muy profundos para dejar sólo los estados permitidos y conservar la equivalencia de fase espectral. En FaCE se adopta esta segunda aproximación y se usan transformaciones supersimétricas de potenciales a dos cuerpos para eliminar el conjunto de estados ligados requerido.

Una transformación supersimétrica de un conjunto de potenciales [151] permite eliminar un estado ligado arbitrario, mientras se conserva la equivalencia espectral de los hamiltonianos inicial y transformado. En la partición q y para cada canal espín-paridad de dos cuerpos, el hamiltoniano inicial $\widehat{H}_0$ para la interacción de dos cuerpos k, p acopla N canales de dos cuerpos para un momento angular total j_q. La ecuación de dos cuerpos es entonces

$$\left(-\frac{\hbar}{2a_{kp}}\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l_n(l_n+1)}{r^2}\right]-E\right)\phi_n(r)+\sum_{n'}^{N}V_{nn'}(r)\phi_{n'}(r)=0; \qquad \text{(C.30)}$$

donde $n \equiv \{l_{xq}, (s_k, s_p)S_{xq}; j_q\}$ denota el canal, $r \equiv r_{kp}$, $l_n \equiv l_{xq(n)}$ y a_{kp} es la masa reducida de los cuerpos k, p. Las energías umbrales $\varepsilon_n = \varepsilon_{s_k} + \varepsilon_{s_p}$ se incluyen en los elementos de matriz diagonales $V_{nn'}(r)$, en adición a los acoplamientos definidos por la ecuación (C.15). Se empieza con una matriz simétrica real del potencial $\widehat{V}_0(r) = \{V_{nn'}(r)\}$ para cada radio y se repite la transformación supersimétrica siguiente para cada estado ligado $i = 1$ hasta el número de estados prohibidos I.

Sea el vector columna $\phi^{\lambda}_{i-1}(r) = \{\phi^{\lambda}_n(r)\}$ el autoestado ligado normalizado de $\widehat{H}_{i-1}$ a la energía real E_λ por debajo de todos los umbrales. Aplicando una doble transformación supersimétrica a $\widehat{H}_{i-1}$ se obtiene un nuevo hamiltoniano $\widehat{H}_i$ donde la matriz del potencial $\widehat{V}_{i-1}(r)$ se sustituye por $\widehat{V}_i(r)$

$$\widehat{V}_i(r) = \widehat{V}_{i-1}(r) - \frac{\hbar^2}{a_{kp}}\frac{d}{dr}\frac{\phi^{\lambda}_{i-1}(r)\phi^{\lambda\dagger}_{i-1}(r)}{\int_0^r dt\ \phi^{\lambda}_{i-1}(t)\phi^{\lambda\dagger}_{i-1}(t)}. \qquad \text{(C.31)}$$

En el caso en el cual el acoplamiento entre los canales se anula cerca del origen, se puede deducir el comportamiento de las partes diagonales de $\widehat{V}_i(r)$ para valores pequeños de r. Si la matriz diagonal de momentos angulares $\{l_n\}$ tiene un único elemento más bajo, l_1, tal que $l_1 < l_n$ para $n = 2, 3, \ldots, N$, en este canal el término adicional en el potencial transformado simétricamente $\widehat{V}_i(r)$ tendrá una singularidad $\hbar^2(2l_1 + 3)/(2a_{kp}r^2)$ para valores pequeños de r, que añadido al

término centrífugo $\hbar^2(l_1+1)/(2a_{kp}r^2)$ da un nuevo término centrífugo $\hbar^2(l_1+2)(l_1+3)/(2a_{kp}r^2)$. La transformación supersimétrica (C.31) en este caso añade un core repulsivo en el origen, incrementando el momento orbital l_1 en 2 unidades. En el resto de canales los momentos orbitales l_n no cambian. Físicamente, esto corresponde a la conservación del cuanto de oscilador $\Lambda = 2n_r + l$ en el sistema: cuando se reduce el número cuántico radial n_r en una unidad se incrementa la parte orbital l en dos. Si la matriz diagonal de momentos angulares $\{l_n\}$ tiene varios elementos igualmente más bajos, el aumento de la singularidad se comparte entre estos canales, incluyendo sus potenciales de acoplamiento.

Bibliografía

[1] C. H. Dasso y A. Vitturi. *The Hispalensis Lectures on Nuclear Physics, Vol. 2: Nuclear Reactions with Exotic Beams.* Editado por J. M. Arias y M. Lozano (Springer-Verlag, Berlín, 2004).

[2] E. H. S. Burhop, D. H. Davis, J. Sacton y G. Schoronchoff. *Nucl. Phys. A* **132**, 625 (1969).

[3] K. Riisager. *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1105 (1994).

[4] P. G. Hansen, A. S. Jensen y B. Jonson. *Annu. Rev. Nucl. Part. Sci.* **45**, 591 (1995).

[5] B. M. Sherrill. *Nucl. Phys. A* **685**, 134 (2001).

[6] J. R. Oppenheimer. *Phys. Rev.* **47**, 845 (1935).

[7] S. M. Dancoff. *Phys. Rev.* **72**, 163 (1947).

[8] R. Serber. *Phys. Rev.* **72**, 1008 (1947).

[9] R. J. Glauber. *Phys. Rev.* **99**, 1515 (1955).

[10] M. J. G. Borge et al. *Nucl. Phys. A* **560**, 664 (1993).

[11] D. J. Morrisey et al. *Nucl. Phys. A* **627**, 222 (1997).

[12] M. J. G. Borge et al. *Phys. Rev. C* **55**, R8 (1997).

[13] D. V. Federov y A. S. Jensen. *Phys. Rev. Lett.* **71**, 4103 (1993).

[14] M. V. Zhukov, B. V. Danilin, D. V. Fedorov, J. M. Bang, I. J. Thompson y J. S Vaagen. *Phys. Rep.* **231**, 151 (1993).

[15] D. V. Federov, A. S. Jensen y K. Riisager. *Phys. Lett. B* **312**, 1 (1993).

[16] E. Garrido, D. V. Fedorov y A. S. Jensen. *Phys. Lett. B* **600**, 208 (2004).

[17] D. J. Millener et al. *Phys. Rev. C* **28**, 497 (1983).

[18] I. Tanihata, H. Hamagaki, O. Hashimoto, Y. Shida, N. Yoshikawa, K. Sugimoto, O. Yamakawa, T. Kobayashi y N. Takahashi. *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2676 (1985).

[19] E. Arnold et al. *Phys. Lett. B* **281**, 16 (1992).

[20] T. Kobayashi et al. *Phys. Lett. B* **232**, 51 (1989).

[21] B. Blank et al. *Z. Phys. A* **343**, 375 (1992).

[22] T. Kobayashi et al. *Phys. Rev. Lett.* **60**, 2599 (1988).

[23] M. H. Smedberg et al. *Phys. Lett. B* **452**, 1 (1999).

[24] Young Li y C. D. Lin. *J. Phys. B* **32**, 4877 (1999).

[25] S. Moszkowski, S. Fleck, A. Krikeb, L. Theussl, J. M. Richard y K. Varga. *Phys. Rev. A* **62**, 032504 (2000).

[26] J. M. Richard. *Few-Body Syst. Suppl.* **0**, 1 (2005).

[27] C. Mao, W. Sun y N. C. Seeman. *Nature* **386**, 137 (1997).

[28] L. Carlucci, G. Ciani y D. M. Proserpio. *Cryst. Eng. Comm.* **5(47)**, 269 (2003).

[29] J. S. Siegel. *Science* **304**, 1256 (2004).

[30] K. S. Chichak, S. J. Cantrill, A. R. Pease, S.-H. Chiu, G. W. V. Cave, J. L. Atwood y J. F. Stoddart. *Science* **304**, 1308 (2004).

[31] A. Bohr y B. R. Mottelson. *Nuclear Structure.* (World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, 1998).

[32] J. Dobaczewski et al. *Phys. Rev. Lett.* **72**, 981 (1994).

[33] B. V. Danilin, S. N. Ershov y J. S. Vaagen. *Phys. Rev. C* **71**, 057301 (2005).

[34] L.-B. Wang et al. *Phys. Rev. Lett.* **93**, 142501 (2004).

[35] T. Bjerge y K. J. Broström. *Nature* **138**, 400 (1936).

[36] A. M. Poskanzer, S. W. Cosper, E. K. Hyde y J. Cerny. *Phys. Rev. Lett.* **17**, 1271 (1966).

[37] B. V. Danilin, M. V. Zhukov, A. A. Korsheninnikov, L. V. Chulkov y V. D. Efros. *Sov. Jour. Nucl. Phys.* **49**, 351 (1989).

[38] B. V. Danilin, M. V. Zhukov, A. A. Korsheninnikov y L. V. Chulkov. *Sov. Jour. Nucl. Phys.* **53**, 71 (1991).

[39] L. D. Faddeev. *JETP* **39**, 1459 (1960).

[40] J. M. Bang, J. J. Benayoun, C. Gignoux y I. J. Thompson. *Nucl. Phys. A* **405**, 126 (1983).

[41] Y. Suzuki y K. Ikeda. *Phys. Rev. C* **38**, 410 (1988).

[42] G. F. Bertsch y H. Esbensen. *Ann. Phys.* **209**, 327 (1991).

[43] L. Johannsen, A. S. Jensen y P. G. Hansen. *Phys. Lett. B* **244**, 357 (1991).

[44] V. I. Kukulin, V. I. Voronchev, T. D. Kaipov y Eramzhyan. *Nucl. Phys. A* **517**, 221 (1990).

[45] W. C. Parke y D. R. Lehman. *Phys. Rev. C* **29**, 2319 (1984).

[46] I. J. Thompson, B. V. Danilin, V. D. Efros, J. M. Bang y M. V. Zhukov. *Phys. Rev. C* **61**, 024318 (2000).

[47] V. I. Kukulin, V. N. Pomerantsev, K. D. Razikov, V. T. Voronchev y G. G. Ryzhikh. *Nucl. Phys. A* **586**, 151 (1995).

[48] M. Hesse, D. Baye y J. M. Sparenberg. *Phys. Lett. B* **455**, 1 (1999).

[49] E. Garrido, D. V. Federov y A. S. Jensen. *Nucl. Phys. A* **617**, 153 (1996).

[50] D. R. Lehman y W. C. Parke. *Phys. Rev. C* **28**, 364 (1983).

[51] T. Aumann et al. *Phys. Rev. C* **59**, 1252–1262 (1999).

[52] B. V. Danilin, I. J. Thompson, J. S. Vaagen y M. V. Zhukov. *Nucl. Phys. A* **632**, 383 (1998).

[53] A. Cobis, D. V. Federov y A. S. Jensen. *Phys. Rec. C* **58**, 1403 (1998).

[54] M. V. Stoitsov, P. Ring, D. Vretenar y G. A. Lalazissis. *Phys. Rev. C* **58**, 2086 (1998).

[55] M. V. Stoitsov, W. Nazarewicz y S. Pittel. *Phys. Rev. C* **58**, 2092 (1998).

[56] M.V. Stoitsov, J. Dobaczewski, P. Ring y S. Pittel. *Phys. Rev. C* **61**, 034311 (2000).

[57] N. Sandulescu, Nguyen Van Giai y R. J. Liotta. *Phys. Rev. C* **61**, 061301 (2000).

[58] S. Mizutori, J. Dobaczewski, G. A. Lalazissis, W. Nazarewicz y P. G. Reinhard. *Phys. Rev. C* **61**, 044326 (2000).

[59] K. Bennaceur, J. Dobaczewski y M. Ploszajczak. *Phys. Rev. C* **60**, 034308 (1999).

[60] I. Cacelli, R. Moccia y A. Rizzo. *Phys. Rev. A* **57**, 1895 (1998).

[61] T. N. Rescigno, A. E. Orel y C. W. McCurdy. *Phys. Rev. A* **55**, 342 (1997).

[62] A. K. Kazansky. *J. Phys. B* **29**, 4709 (1996).

[63] J. M. Vogels, B. J. Verhaar y R. H. Blok. *Phys. Rev. A* **57**, 4049 (1998).

[64] M. B. Campbell, T. J. Bensky y R. R. Jones. *Phys. Rev. A* **57**, 4616 (1998).

[65] B. I. Schneider. *Phys. Rev. A* **55**, 3417 (1997).

[66] A. K. Kazansky. *J. Phys. B* **30**, 1401 (1997).

[67] A. C. Mueller et al. *Nuclear Physics in Europe: Highlights and Opportunities.* Editado por J. Vervier et al., NuPECC Report, p. 31 (1997).

[68] G. Gamow. *Z. Phys.* **51**, 204 (1928).

[69] G. Gamow. *Z. Phys.* **52**, 510 (1928).

[70] A. F. J. Siegert. *Phys. Rev.* **56**, 750 (1939).

[71] O. I. Tolstikhin, V. N. Ostrovsky y H. Nakamura. *Phys. Rev. Lett.* **79**(11) (1997).

[72] O. I. Tolstikhin, V. N. Ostrovsky y H. Nakamura. *Phys. Rev. A* **58**, 2077 (1998).

[73] E. P. Wigner y L. Eisenbud. *Phys. Rev.* **72**, 29 (1947).

[74] E. P. Wigner y L. Eisenbud. *Atomic and Molecular Processes: An R-Matrix Approach.* Editado por P.G. Burke y K. A. Berrington (IOP, Bristol, 1993).

[75] A. M. Lane y R. G. Thomas. *Rev. Mod. Phys.* **30**, 257 (1958).

[76] M. Rotenberg. *Adv. At. Mol. Phys.* **6**, 233 (1970).

[77] F. Antonsen. *Phys. Rev. A* **60**, 812 (1999).

[78] R. Szmytkowski y B. Zywicka-Mozejko. *Phys. Rev. A* **62**, 022104 (2000).

[79] N. Austern, Y. Iseri, M. Kamimura, M. Kawai, G. Rawitsher y M. Yahiro. *Phys. Rep.* **154**, 125 (1987).

[80] T. Matsumoto, T. Kamizato, K. Ogata, Y. Iseri, E. Hiyama, M. Kamimura y M. Yahiro. *Phys. Rev. C* **68**, 064607 (2003).

[81] A. Macías, F. Martín, A. Riera y M. Yáñez. *Phys. Rev. A* **36**, 4179 (1987).

[82] A. Macías, F. Martín, A. Riera y M. Yáñez. *Phys. Rev. A* **36**, 4187 (1987).

[83] A. Macías, F. Martín, A. Riera y M. Yáñez. *Phys. Rev. A* **36**, 4203 (1987).

[84] M. Moshinsky y Y. Smirnov. *The Harmonic Oscillator in Modern Physics.* (Harwood Academic, Amsterdam, 1996).

[85] I. Zh. Petkov y M. V. Stoitsov. *Compt. Rend. Bulg. Acad. Sci.* **34**, 1651 (1981).

[86] I. Zh. Petkov y M. V. Stoitsov. *Theor. Math. Phys.* **55**, 584 (1983).

[87] I. Zh. Petkov y M. V. Stoitsov. *Yad. Fiz.* **37**, 1167 (1983).

[88] I. Zh. Petkov y M. V Stoitsov. *Sov. J. Nucl. Phys.* **37**, 692 (1983).

[89] M. V. Stoitsov y I. Zh. Petkov. *Ann. Phys. (N. Y.)* **184**, 121 (1988).

[90] I. Zh. Petkov y M. V Stoitsov. *Nuclear Density Functional Theory, Oxford Studies in Physics.* (Clarendon, Oxford, 1991).

[91] F. Pérez-Bernal, I. Martel, J. M. Arias y J. Gómez-Camacho. *Phys. Rev. A* **63**, 052111 (2001).

[92] F. Pérez-Bernal, I. Martel, J. M. Arias y J. Gómez-Camacho. *Few-Body Syst. Suppl.* **13**, 217 (2001).

[93] A. M. Moro, J. M. Arias, J. Gómez-Camacho, I. Martel, F. Pérez-Bernal, R. Crespo y F. Nunes. *Phys. Rev. C* **65**, 011602 (2001).

[94] I. Martel, F. Pérez-Bernal, M. Rodríguez-Gallardo, J. M. Arias y J. Gómez-Camacho. *Phys. Rev. A* **65**, 052708 (2002).

[95] F. Pérez-Bernal, I. Martel, J. M. Arias y J. Gómez-Camacho. *Phys. Rev. A* **67**, 052108 (2003).

[96] Y. Alhassid, F. Iachello y R. D. Levine. *Phys. Rev. Lett.* **54**, 1746–1749 (1985).

[97] E. Hiyama, Y. Kino y M. Kamimura. *Prog. Part. Nucl. Phys.* **51**, 233 (2003).

[98] J. Aguilar y J. M. Combes. *Nucl. Phys.* **22**, 169 (1971).

[99] Y. K. Ho. *Phys. Rep.* **99**, 1 (1983).

[100] T. Myo, A. Ohnishi y K. Kato. *Prog. Theor. Phys.* **99**, 801 (1998).

[101] T. Myo, K. Kato, S. Aoyama y K. Ikeda. *Phys. Rev. C* **63**, 054313 (2001).

[102] T. Myo, S. Aoyama, K. Kato y K. Ikeda. *Nucl. Phys. A* **738**, 298 (2004).

[103] E. Garrido, D. V. Fedorov y A. S. Jensen. *Nucl. Phys. A* **708**, 277 (2002).

[104] D. V. Fedorov, E. Garrido y A. S. Jensen. *Few-Body Syst.* **33**, 153 (2003).

[105] A. U. Hazi y H. S. Taylor. *Phys. Rev. A* **1**, 1109 (1970).

[106] J. N. Ginocchio. *Ann. Phys.* **152**, 203 (1984).

[107] J. N. Ginocchio. *Ann. Phys.* **159**, 467 (1985).

[108] S. Pittel y M. V. Stoitsov. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **24**, 1461 (1998).

[109] Z. Ahmed. *Phys. Lett. A* **281**, 213 (2001).

[110] G. A. Natanzon. *Vestn. Leningr. Univ., Fiz., Khim.* **10**, 22 (1971).

[111] G. A. Natanzon. *Theor. Math. Phys.* **38**, 146 (1979).

[112] G. Pöschl y E. Teller. *Z. Phys.* **83**, 143 (1933).

[113] Y. Sakuragi, M. Yahiro y M. Kamimura. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **89**, 136 (1986).

[114] M. Kamimura, M. Yahiro, H. Kameyama, Y. Sakuragi y M. Kawai. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **89**, 1 (1986).

[115] F. M. Nunes y I. J. Thompson. *Phys. Rev. C* **59**, 2652 (1999).

[116] G. R. Satchler. *Direct Nuclear Reactions.* (Oxford University Press, New York, 1983).

[117] F. M. Nunes y I. J. Thompson. *Phys. Rev. C* **57**, R2818 (1998).

[118] F. M. Nunes, R. Shyam y I. J. Thompson. *J Phys. G* **24**, 1575 (1998).

[119] R. Shyam y I. J. Thompson. *Phys. Rev. C* **59**, 2645 (1999).

[120] C. H. Dasso, S. M. Lenzi y A. Vitturi. *Nucl. Phys. A* **639**, 635 (1998).

[121] M. Yahiro, N. Nakano, Y. Iseri y M. Kamimura. *Prog. Theor. Phys.* **67**, 1464 (1982).

[122] N. Austern., M. Yahiro y M. Kawai. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2649 (1989).

[123] N. Austern, M. Kawai y M. Yahiro. *Phys. Rev. C* **53**, 314 (1996).

[124] R. A. D. Piyadasa, M. Kawai, M. Kamimura y M. Yahiro. *Phys. Rev. C* **60**, 044611 (1999).

[125] T. Sawada y K. Thushima. *Prog. Theor. Phys.* **76**, 440 (1986).

[126] T. Sawada y K. Thushima. *Prog. Theor. Phys.* **79**, 1378 (1986).

[127] T. Egami, K. Ogata, T. Matsumoto, Y. Iseri, M. Kamimura y M. Yahiro. *Phys. Rev. C* **70**, 047604 (2004).

[128] K. Ogata, M. Yahiro, Y. Iseri, T. Matsumoto, y M. Kamimura. *Phys. Rev. C* **68**, 064609 (2003).

[129] N. C. Summers et al. *Phys. Rev. C* **66**, 014614 (2002).

[130] J. A. Christley et al. *Nucl. Phys. A* **624**, 275 (1997).

[131] J. S. Al-Khalili, I. J. Thompson y J. A. Tostevin. *Nucl. Phys. A* **581**, 331 (1995).

[132] T. Matsumoto, E. Hiyama, K. Ogata, Y. Iseri, M. Kamimura, S. Chiba y M. Yahiro. *Phys. Rev. C* **70**, 061601 (2004).

[133] G. R. Satchler y W. G. Love. *Phys. Rep.* **55**, 183 (1979).

[134] M. Kamimura, T. Matsumoto, E. Hiyama, K. Ogata, Y. Iseri y M Yahiro. *nucl-th/0506012v1* (2005).

[135] E. Hiyama, B. F. Gibson y M. Kamimura. *Phys. Rev. C* **70**, 031001 (2004).

[136] P. M. Morse. *Phys. Rev.* **34**, 57 (1929).

[137] M. Rodríguez-Gallardo. *Descripción de resonancias en una base discreta* (2004). Trabajo de investigación. Universidad de Sevilla.

[138] F. Catara, C. H. Dasso y A. Vitturi. *Nucl. Phys. A* **602**, 181 (1996).

[139] M. Rodríguez-Gallardo, J. M. Arias y J. Gómez-Camacho. *Phys. Rev. C* **69**, 034308 (2004).

[140] I. J. Thompson, F. M. Nunes y B. V. Danilin. *Comput. Phys. Commun.* **161**, 87 (2004).

[141] I. J. Thompson. *Programa sturmxx* (2002). Manual disponible del autor.

[142] D. M. Brink y G. R. Satchler. *Angular Momentum.* (Clarendon, Oxford, 1994).

[143] M. Rodríguez-Gallardo, J. M. Arias, J. Gómez-Camacho, A. M. Moro, I. J. Thompson y J. A. Tostevin. *Phys. Rev. C* **72**, 024007 (2005).

[144] I. J. Thompson. *Comput. Phys. Rep.* **7**, 167 (1988).

[145] A. R. Barnett y J. S. Lillet. *Phys. Rev. C.* **9**, 2010 (1974).

[146] M. L. Roberts et al. *Phys. Rev. C* **44**, 2006 (1991).

[147] A. M. Sánchez-Benítez. *Estudio de la dispersión elástica de* ^{6}*He a energías en torno a la barrera de Coulomb* (2005). Tesis doctoral. Universidad de Huelva.

[148] J. Raynal y J. Revai. *Nuovo Cim.* **68A**, 612 (1970).

[149] T. H. Gronwall. *Phys. Rev.* **51**, 655 (1937).

[150] L. M. Delves. *Nucl. Phys.* **20**, 268 (1962).

[151] J. M. Sparenberg y D. Baye. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 3802 (1997).

[152] K. Rusek et al. *Phys. Rev. C* **70**, 014603 (2004).

[153] M. Rodríguez-Gallardo et al. En preparación.

Manuela Rodríguez Gallardo

Descripción del continuo en una base d'orbi-
tales: estructura del núcleo ^4He y las reacciones
que induce.

Sobresaliente cum laude

por unanimidad.

12 Diciembre 2005

El PRESIDENTE