



UNIVERSIDAD DE GRANADA  
FACULTAD DE CIENCIAS

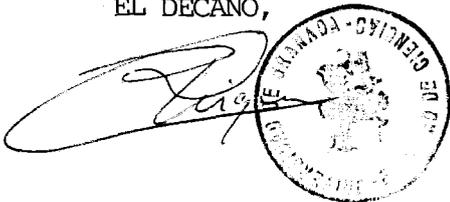
DON ANTONIO RUBIO AYUSO, PROFESOR Y SE-  
CRETARIO DE LA FACULTAD DE CIENCIAS DE  
LA UNIVERSIDAD DE GRANADA

Núm. 711

CERTIFICO: Que la presente Tesis Doctoral  
corresponde a la presentada en esta -  
Facultad por D<sup>a</sup> M<sup>a</sup> Cruz Bosca Diaz --  
Pintado que fue calificada con Apto -  
"cum laude" el día 3 de marzo de 1986  
por el Tribunal correspondiente que -  
fue aprobado en Junta de Facultad ce-  
lebrada el día 26 de Febrero de 1.986  
siendo el tema "Descripción de Nucleos  
ligeros mediante una base de funcio--  
nes correlacionada".

Y para que conste y surta los efectos  
oportunos, se extiende la presente certi-  
ficación con el visto bueno del Ilmo. Sr.  
Decano de esta Facultad de Granada a seis  
de Mayo de mil novecientos ochenta y seis.

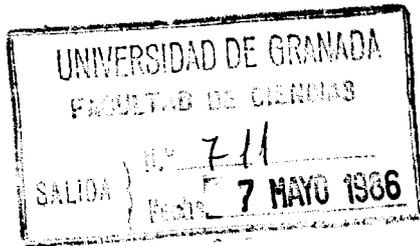
Vº Bº  
EL DECANO,



R. 31. 637

DESCRIPCION DE NUCLEOS LIGEROS MEDIANTE UNA  
BASE DE FUNCIONES CORRELACIONADAS.

MARIA DE LA CRUZ BOSCA DIAZ-PINTADO  
GRANADA, ENERO 1986



Memoria que presenta la licenciada  
Da Ma Cruz Boscá Díaz-Pintado para  
optar al grado de Doctora en Cienc-  
cias (Sección Físicas).

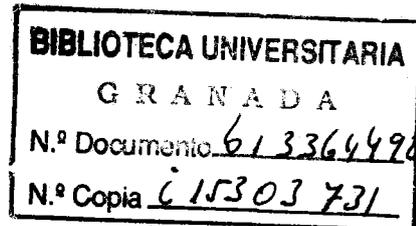
La Licenciada:

Fdo.: Ma Cruz Boscá Díaz-Pintado

El Director del trabajo:

Fdo.: Rafael Guardiola Bárceña

Catedrático de Física Atómica, Molecular y Nuclear.



DESCRIPCION DE NUCLEOS LIGEROS MEDIANTE UNA  
BASE DE FUNCIONES CORRELACIONADAS.

Tesis presentada para optar al grado de Doctora en Ciencias,  
Sección de Físicas, por

MARIA DE LA CRUZ BOSCA DIAZ-PINTADO.

Realizada bajo la dirección del Profesor Dr. D. RAFAEL GUARDIOLA  
BAROENA, Catedrático de Física Atómica, Molecular y Nuclear de la  
Universidad de Granada, y juzgada el 3 de marzo de 1986, en la  
Facultad de Ciencias de dicha Universidad, por el siguiente  
Tribunal:

Presidente: Prof. Dr. D. GONZALO MADURGA LAÇALLE, Catedrático de  
Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad  
de Sevilla.

Vocales: Prof. Dr. D. EULOGIO OSET BAQUENA, Catedrático de Física  
Atómica y Nuclear de la Universidad de Valladolid.

Prof. Dr. D. JOSE ROS PALLARES, Catedrático de Física  
Teórica de la Universidad de Valencia.

Prof. Dr. D. MANUEL BARRANÇO GOMEZ, Profesor Titular de  
Física Atómica, Molecular y Nuclear de la Universidad  
Central de Barcelona.

Secretario: Prof. Dr. D. ENRIQUE BUENDIA AVILA, Profesor  
Colaborador de la Universidad de Granada.

Calificación obtenida:

APTO CUM LAUDE

Sirvan estas líneas para expresar mi agradecimiento a D. Rafael Guardiola por su interés y ayuda durante la realización de este trabajo.

Mi agradecimiento también a D. Arturo Polls por su colaboración en una primera fase del trabajo.

Mi gratitud asimismo a todos los miembros de los Departamentos de Física Teórica y Física Atómica y Nuclear por el estímulo y ayuda prestados.

A mis padres.

A José María.

0. INTRODUCCION.

El objetivo de este trabajo es la aplicación de la teoría de funciones de base correlacionada para la descripción tanto de los estados fundamentales de los núcleos de la capa p como de su espectroscopía, en el marco de la mecánica cuántica no relativista.

Resulta evidente afirmar que uno de los principales objetivos de la Física Nuclear es entender la estructura del núcleo y explicar sus propiedades de todo tipo. Para ello se hace necesario estudiar los componentes primeros del núcleo, cuyas interacciones hacen posible su existencia: los nucleones.

Debido a su gran complejidad, este problema de muchos cuerpos es irresoluble de forma exacta. Es preciso pues adoptar esquemas de aproximación que, reduciendo el número de parámetros intervinientes, permitan realizar una descripción del núcleo.

El modelo de capas proporciona numerosos éxitos cualitativos en tal descripción (PRE75; LAW80). Este modelo supone los nucleones moviéndose en el seno de un campo medio central, de manera que tiene sentido hablar de orbitales monoparticulares, siendo el movimiento de cada nucleón independiente de cuáles sean las posiciones de los restantes en un instante dado. Con estas premisas, propiedades nucleares tales como, por ejemplo, la sistemática de las energías de separación, con la existencia de los denominados "números mágicos", los valores experimentales del momento angular  $J$ , etc., son explicadas de manera bastante satisfactoria.

Sin embargo, tales suposiciones son incompatibles con la evidencia de la presencia de un "core" nuclear o zona fuertemente repulsiva a cortas distancias en los canales de la interacción nucleón-nucleón (JAS51,55; ROW70). Su existencia imposibilita la

hipótesis de cualquier potencial medio y, además, considerando funciones de onda asociadas con el modelo de capas, como por ejemplo determinantes de Slater contruidos a partir de los correspondientes orbitales monoparticulares, tal core en el Hamiltoniano nuclear nos llevaría a la obtención para sus valores esperados de energías positivas elevadas o, en otras palabras, a una ausencia de ligadura. El problema alcanzaría el límite de encontrarnos con valores infinitos de energías en el caso de considerar cores a su vez infinitos.

Dos métodos han surgido principalmente para corregir esta situación. El primero de ellos, la teoría de Brueckner-Bethe-Goldstone, se basa esencialmente en la construcción de una serie perturbativa en diagramas conexos para la determinación de las energías de los estados de un sistema infinito de fermiones (BRU54,55; GOL57; BET63,71; DAY67,79; MAH81). Esta teoría ha sido también aplicada al estudio del núcleo finito (DAV69; SAV69,70; KAL64; TRI74; ZAB74; MUT75; ANA78; GUA81ab; FAE81), y puede decirse que constituye hoy una teoría ampliamente desarrollada.

El segundo es conocido con el nombre de método variacional de Jastrow. Fue sugerido por él mismo (JAS55), y su idea principal es completar el modelo de capas con la inclusión de adecuadas funciones de correlación que permitan hacer uso de interacciones realistas con repulsión a cortas distancias. La misión de estas funciones será evitar el core, o sea, atenuar (o anular en el caso de core infinito) la función de ondas del sistema de dos nucleones si estos penetran en la zona repulsiva.

En su forma más sencilla, tal como fue propuesto por Jastrow, el método considera una función de ondas en la forma

$$\Psi(x_1, \dots, x_A) = \prod_{i < j} f(\bar{r}_i - \bar{r}_j) \phi(x_1, \dots, x_A) \quad (0.1)$$

donde  $x_1$  representa el conjunto de todas las coordenadas que caracterizan al nucleón  $i$ -ésimo;  $\phi$  es la función de la descripción del modelo de capas del núcleo;  $\prod_{i < j} f(\bar{r}_i - \bar{r}_j)$  es el factor de correlación. Este último tomará valores muy pequeños (o nulos) en la zona del core, y crecerá hasta alcanzar el valor 1 en cierta longitud suficientemente pequeña respecto a las dimensiones del núcleo (funciones de este tipo fueron usadas anteriormente por Drell y Huang, DRE53).

Es debido a esta forma de la función de ondas por lo que el método, generalizado, es conocido con el nombre de "método de la función de onda generalizada" ("correlated-wave-function", CWF), o, en su forma más elaborada, "método de la base de funciones correlacionadas" ("correlated-basis-functions", CBF) (FEE59,65,66; CLA66,79ab,80; KRO79; MEA80).

Una vez definida así, esta función es tratada como una función de prueba variacional, obteniéndose en consecuencia valores esperados del Hamiltoniano nuclear que constituirán cotas superiores a la energía del estado fundamental.

Señalemos que, aunque fue propuesto casi simultáneamente a la teoría de Brueckner (año 1955), el método de Jastrow no comenzó a ser extensivamente desarrollado hasta los años 70, en los que la denominada "crisis de la materia nuclear" (CLA79c), provocada por el hecho de que cálculos con este método proporcionaban valores de ligadura más bajos que los correspondientes a la teoría de Brueckner, impulsó su estudio y aplicación, especialmente para sistemas infinitos.

Una de las principales dificultades que aparecen en este

método, al realizar el cálculo de los valores esperados, es la necesidad, como consecuencia de la presencia del factor de correlación en la función de ondas, de evaluar integrales multidimensionales con integrandos no separables.

Dos grandes grupos de técnicas de aproximación han surgido para solventar esta dificultad:

1.) Aquéllas que trabajan efectuando desarrollos para sumas de familias de diagramas, con el fin de permitir la evaluación de las energías variacionales: métodos de cadenas superentrelazadas, tal como la teoría HNC ("Hypernetted-Chain") de Van Leeven, Groenoveld y De Boer (LEE59) para sistemas bosónicos, y su generalización para fermiones, teoría FHNC ("Fermi-Hypernetted-Chain"), desarrollada por Fantoni y Rosati (FAN75; ROS81); Krostcheck y Ristig (KRO75), y aplicada tanto a sistemas infinitos como finitos (FAN79).

2.) Las que aproximan el problema de  $A$  cuerpos en términos de problemas de  $1, 2, 3, \dots, n$  cuerpos: métodos de desarrollos en clusters. Estos permiten separar las contribuciones sucesivas a los valores esperados por parte de  $1, 2, 3, \dots, n$  cuerpos, pudiendo en consecuencia aproximar los elementos de matriz de los  $A$  cuerpos en función de elementos de hasta  $n$  cuerpos,  $n \ll A$ .

En nuestro trabajo haremos uso de este segundo grupo de técnicas, cuyo desarrollo será brevemente expuesto en el apartado 2 de esta memoria. Su marco de aplicación será la ya mencionada teoría de la base de funciones correlacionadas, CBF, cuyas generalidades e ingredientes principales están contenidos por su parte en el apartado 1. Merced a ella podemos hacer un estudio tanto de los estados fundamentales como de los excitados, limitándonos a los núcleos de capa  $p$  ( $5 \leq A \leq 16$ ) en nuestro

estudio.

Estudios CBF en materia nuclear han sido realizados tanto para potenciales centrales, con funciones variacionales a lo Jastrow y correlaciones independientes del estado (BAC69), como para potenciales realistas, haciendo uso de factores de correlación dependientes del estado (RIS71,72; KUR78,79; PAN79; CLA79b).

Por lo que respecta al estudio CBF de núcleos finitos son muchos menos los trabajos efectuados. Mencionemos los de Dabrowski (DAB58), Warke y Gunye (WAR79), Mead y Clark (MEA80) y Guardiola (GUA79,81), los cuales usan correlaciones centrales con potenciales fenomenológicos tipo Brink-Boeker (BRI67), OMY (OHM56), Afnan-Tang (AFN58) y similares. En estos estudios la correlación es tomada con formas analíticas sencillas, normalmente combinación de gaussianas conteniendo diversos parámetros libres respecto a los que se minimizan los valores de las energías para los estados fundamentales. Clark y Mead, en el artículo citado, incluyen también la aplicación a la determinación de los niveles de paridad impar del  $^{16}\text{O}$ .

Irvine et al. (IRV76) han utilizado el método CBF para calcular la espectroscopía de los núcleos con número másico A comprendido entre 5 y 12, trabajando con el potencial de Reid soft-core (REI68), una correlación con componentes no centrales en los canales  $^3\text{S}_1$ - $^3\text{D}_1$  y funciones radiales correspondientes en forma de gaussianas. Estas contienen también parámetros libres fijados a partir de la minimización del estado fundamental de cada núcleo.

En sistemas infinitos, y en el cálculo con potenciales realistas tales como el de Reid ya citado, de Hamada-Johnston (HAM62), Gammel-Thaler (Gam57), etc., la aplicación de métodos variacionales con restricciones en bajo orden

("lowest-order-constrained-variational", LOCV) ha sido objeto de diversos estudios (PAN71,72; OWE76,77; HOW78; KUR79). Bishop et al. (BIS78) los han aplicado también al estudio del estado fundamental de los núcleos  $^4\text{He}$ ,  $^{12}\text{C}$  y  $^{16}\text{O}$ ; lo mismo Pandharipande (PAN74).

En nuestro trabajo, como ya dijimos al principio de esta introducción, aplicamos la teoría CBF al estudio de los estados fundamentales y espectroscopia de los núcleos en capa p. Haremos uso de expansiones en clusters que cortaremos en segundo orden y, con el fin de asegurar la convergencia necesaria para que el cálculo en bajo orden tenga sentido, imponemos sobre el correspondiente operador de correlación a dos cuerpos (dependiente del estado y que será especificado en el apartado 1) una restricción tal como la condición de Pauli o la secuencial, alternativamente. Ambas han sido estudiadas y aplicadas frecuentemente (GUA79,80; CLA79a,79b,81).

Las funciones radiales componentes de la correlación deberán a su vez satisfacer determinadas condiciones de frontera para cierta distancia denominada "distancia de healing". Su imposición, conjuntamente con una de las dos condiciones subsidiarias anteriormente mencionadas, nos permitirá plantear, a través de un tratamiento variacional del estado fundamental de cada núcleo, un conjunto de ecuaciones acopladas de Euler-Lagrange. La obtención y resolución de estas ecuaciones constituye el contenido del apartado 6 de esta memoria.

Estamos por tanto, en resumen, desarrollando un método LOCV en el marco de la CBF. Los resultados obtenidos se exponen detalladamente en el apartado 7, donde realizamos también una comparación con los artículos mencionados que atañen a núcleos finitos.

1. ASPECTOS GENERALES DE LA TEORIA CBF.

1.1. Interacción nucleón-nucleón.

1.2. Función de ondas y factor de correlación.

1.3. Problema generalizado de valores propios.

### 1.1 Interacción nucleón-nucleón.

En este trabajo consideraremos el núcleo como un sistema de A nucleones interactuando entre sí a través de un Hamiltoniano a dos cuerpos H

$$H = \sum_{i=1}^A T(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq A} V(i,j) \quad (1.1)$$

$$T(i) = \frac{P^2(i)}{2m} \quad (1.2)$$

y buscaremos soluciones estacionarias de la correspondiente ecuación de Schrodinger. La interacción  $V(i,j)$  será supuesta como la de dos nucleones libres, describiéndose mediante un potencial realista que responderá a la forma general

$$V(1,2) = \sum_{i=1}^8 V_i(r) O^i \quad (1.3)$$

$$\left\{ O^i \right\}_{i=1}^8 = \left\{ 1, \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2, \bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2, (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_1)(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_1), S_{12}, S_{12}(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_1), \bar{L} \cdot \bar{S}, \bar{L} \cdot \bar{S}(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_1) \right\}, \quad (1.4)$$

siendo  $\bar{r}$  la coordenada relativa del sistema de los dos nucleones;  $\bar{\sigma}_i$  y  $\bar{\tau}_i$  los usuales espín e isospín de cada nucleón;  $S_{12}$  el operador tensorial definido (PRE75)

$$S_{12} = \frac{(\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{r})(\bar{\sigma}_2 \cdot \bar{r})}{r^2} 3 - \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 \quad (1.5)$$

$$= 6Q - 4P_3$$

$$Q = \frac{(\bar{S} \cdot \bar{r})^2}{r^2} \quad (1.6)$$

$$\bar{S} = \frac{1}{2} (\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2) \quad (1.7)$$

siendo  $P_3$  el proyector sobre estados triplete de espín y Q el proyector sobre el espacio espín-ángulo.

Como tal potencial concreto hemos elegido el potencial de Reid V-8 (PAN79), construido a partir del potencial usual de Reid soft-core (REI68). Este potencial, que responde a la forma general (1.3)-(1.4), una vez descompuesta su acción sobre cada canal S-T (espín-isoespín), puede representarse según la expresión

$$\begin{aligned} V(r) = & V_C^{01}(r) P_1 P^+ + V_C^{00}(r) P_1 P^- + V_C^{10}(r) P_3 P^+ + V_C^{11}(r) P_3 P^- \\ & + V_T^{10}(r) S_{12} P_3 P^+ + V_T^{11}(r) S_{12} P_3 P^- \\ & + V_{LS}^{10}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^+ + V_{LS}^{11}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^-, \end{aligned} \quad (1.8)$$

en la cual los superíndices refieren a los distintos canales ST; los subíndices C, T y LS indican respectivamente si se trata de una componente central, tensorial o espín-órbita.

Este potencial se construye a partir del Reid soft-core con las elecciones siguientes para sus funciones radiales

$$\begin{aligned} V_C^{01}(r) &\equiv V_{C \text{ REID}}^{01}(r) \quad {}^1S_0 \\ V_C^{00}(r) &\equiv V_{C \text{ REID}}^{00}(r) \quad {}^1P_1 \\ V_C^{10}(r), V_T^{10}(r), V_{LS}^{10}(r) &\equiv V_{C \text{ REID}}^{10}(r), V_{T \text{ REID}}^{10}(r), V_{LS \text{ REID}}^{10}(r) \quad {}^3S_1 - {}^3D_1 \\ V_C^{11}(r), V_T^{11}(r), V_{LS}^{11}(r) &\equiv V_{C \text{ REID}}^{11}(r), V_{T \text{ REID}}^{11}(r), V_{LS \text{ REID}}^{11}(r) \quad {}^3P_2 - {}^3F_2, \end{aligned} \quad (1.9)$$

de forma que se tiene

$$\begin{aligned} V_C^{01}(r) &= -h \frac{e^{-x}}{x} - 1650.6 \frac{e^{-4x}}{x} + 6484.2 \frac{e^{-7x}}{x} \\ V_C^{00}(r) &= 3h \frac{e^{-x}}{x} - 634.39 \frac{e^{-2x}}{x} + 2163.4 \frac{e^{-3x}}{x} \\ V_C^{10}(r) &= -h \frac{e^{-x}}{x} + 105.468 \frac{e^{-2x}}{x} - 3187.8 \frac{e^{-4x}}{x} + 9924.3 \frac{e^{-6x}}{x} \\ V_C^{11}(r) &= \frac{1}{3} h \frac{e^{-x}}{x} - 933.68 \frac{e^{-4x}}{x} + 4152.1 \frac{e^{-6x}}{x} \\ V_T^{10}(r) &= -h \frac{1}{x} \left[ \left(1 + \frac{3}{x} + \frac{3}{x^2}\right) e^{-x} - \left(\frac{12}{x} + \frac{3}{x^2}\right) e^{-4x} \right] + 351.77 \frac{e^{-4x}}{x} - 1673.5 \frac{e^{-6x}}{x} \\ V_T^{11}(r) &= h \frac{1}{x} \left[ \left(\frac{1}{3} + \frac{1}{x} + \frac{1}{x^2}\right) e^{-x} - \left(\frac{4}{x} + \frac{1}{x^2}\right) e^{-4x} \right] - 34.925 \frac{e^{-3x}}{x} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_{L_5}^{10}(r) &= 708.91 \frac{e^{-4x}}{x} - 2713.1 \frac{e^{-6x}}{x} \\
 V_{L_5}^{11}(r) &= -2074.1 \frac{e^{-6x}}{x} \quad , \quad (1.10)
 \end{aligned}$$

valores expresados en MeV, con  $\hbar=10.463$  MeV y  $x=\mu r$ ,  $\mu=0.7 \text{ fm}^{-1}$ .

En la figura (1) se hallan representadas las distintas componentes de este potencial. Como se observa, su core alcanza una altura de más de 800 MeV para  $r \approx 0.4 \text{ fm}$ .

El potencial realista de Reid soft-core, en su forma original, intenta ajustar los datos experimentales para los corrimientos de fase en la colisión de nucleones libres, y viene dado explícitamente para cada onda parcial del sistema de dos nucleones con  $J \leq 2$ , presentando todos los estados una cola correspondiente al potencial OPEP, "one-pion-exchange-potential" (PRE75; EIS72), el cual es también aplicado en todas las ondas con  $J > 2$ .

El potencial Reid V-8 aquí considerado constituye una simplificación del anterior. En este sentido, tal vez debiéramos considerarlo más correctamente como un potencial "semirealista".

### 1.2. Función de ondas. Factor de correlación.

La teoría de la base de funciones de onda correlacionadas (FEE59,65,66; CLA66,79ab,80; KRO79; MEA80), o teoría CBF, considera un conjunto de funciones correlacionadas  $\{|\Psi_m\rangle\}$  que constituye un sistema base generalmente no ortogonal. Las funciones  $|\Psi_m\rangle$  componentes de esta base correlacionada son construidas a partir de un conjunto de estados base de la descripción del núcleo en el marco del modelo de capas mediante la aplicación de un operador de correlación F,

$$|\Psi_m\rangle = F |\phi_m\rangle \quad (1.11)$$

o, normalizándolas,

$$|\Psi_m\rangle = \frac{F |\phi_m\rangle}{\langle \phi_m | F | \phi_m \rangle} \quad (1.12)$$

Estos estados modelo  $|\phi_m\rangle$  determinan la estadística y simetrías del sistema, mientras que el operador de correlación  $F$  incorpora a la base principalmente las correlaciones de corto alcance inducidas por la presencia del core nuclear.

Los estados ortonormales  $|\phi_m\rangle$  no correlacionados son elegidos en este trabajo como funciones antisimétricas con momentos angular  $J$  y de isoespín  $T$  totales bien definidos. Estas funciones serán combinaciones lineales <sup>de</sup> determinantes de Slater construidas a partir de las funciones monoparticulares que representaremos como

$$\Theta_{\alpha_i}(\bar{\omega}_i) = R_{\beta_i}(r) \left[ Y_{\ell} \times \chi_{\sigma_i} \right]_{jm} \Theta_{\alpha_i}, \quad (1.13)$$

donde  $R$ ,  $\chi$  y  $\Theta$  simbolizan respectivamente las partes radial, de espín y de isoespín de la función de ondas total;  $\bar{\omega}$  el conjunto de todas las coordenadas (espaciales, de espín y de isoespín);  $\alpha_i$  y  $\beta_i$  los conjuntos de números cuánticos necesarios para especificar completamente las funciones de onda total y radial; el corchete simboliza el acoplamiento de la función angular o armónico esférico  $Y_{\ell m}$  con la función de espín  $\chi_{\sigma_i}$ , para dar un momento angular  $j$ , tercera componente  $m$ .

Las funciones radiales  $R_{\beta}(r)$  son tomadas como las correspondientes a las funciones propias del Hamiltoniano del oscilador armónico

$$H_{h.o.} = \frac{p^2}{m} + \frac{1}{2} m \omega^2 r^2, \quad (1.14)$$

de manera que  $\beta$  representará los dos números cuánticos  $n$ , principal, y  $l$ , de momento orbital, siendo su expresión

$$R_{n\ell}(r) = \left[ \frac{2^{\ell-n+2} (2\ell+2n+1)!!}{\sqrt{\pi} n! [(2\ell+1)!!]^2 b^{2\ell+3}} \right]^{1/2} e^{-\frac{r^2}{2b^2}} r^{\ell} \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k 2^k n! (2\ell+1)!!}{k! (n-k)! (2\ell+2k+1)!!} \left(\frac{r}{b}\right)^{2k}, \quad b^2 = \frac{\hbar}{m\omega}, \quad n, \ell = 0, 1, 2, \dots \quad (1.15)$$

Las funciones  $|\phi_m\rangle$  representarán situaciones en el modelo de

capas en las que:

i) No hay ningún nucleón fuera de la capa  $0p$  del oscilador, funciones cero partícula-cero hueco ( $0p-0h$ ).

ii) Un nucleón ha sido promocionado desde la capa  $0p$  a las  $1s0d$ , funciones una partícula-un hueco ( $1p-1h$ ).

iii) Dos nucleones parten de la capa  $0p$  hasta las  $1s0d$ , funciones dos partículas-dos huecos ( $2p-2h$ ).

La construcción de todas estas funciones será abordada detalladamente en el apartado tercero de esta memoria.

El factor de correlación  $F$  es tomado simétrico en los índices de las  $A$  partículas, invariante traslacionalmente y poseyendo además la propiedad denominada "descomposición en clusters", consistente en que si se separan  $n$  partículas de las restantes  $A-n$ , lo suficiente como para evitar su interacción, el operador puede ser descompuesto según el producto

$$F(1, \dots, A) = F_n(1, \dots, n) F_{A-n}(n+1, \dots, A) \quad (1.16)$$

Como veremos posteriormente, esta propiedad será esencial en la derivación de las expansiones en clusters.

El operador de correlación  $F$  podrá tener una estructura general que involucre dependencia en todos los observables fundamentales de las  $A$  partículas. Como ya hemos dicho, su tarea es incorporar a la base las correlaciones de corto alcance inducidas por el potencial  $V\{1,2\}$  a través especialmente del core presentado por este último.

En este trabajo consideraremos un operador de correlación  $F$  a dos cuerpos dependiente del estado, con estructura general

$$F = S \left\{ \prod_{1 \leq i < j \leq A} F_2(i,j) \right\} \quad (1.17)$$

donde S representa el correspondiente simetrizador,

$$S = \frac{1}{A!} \sum_{P_A} \quad (1.18)$$

simbolizando  $P_A$  todas las permutaciones posibles sobre las A partículas.

La correlación para el subsistema de dos partículas tiene la estructura de operador hermitico dada por (RIS71; OWE76c,77)

$$F_2(1,2) = F^+(1,2) P^+ + F^-(1,2) P^- \quad (1.19)$$

$$F^\pm(1,2) = f_1^\pm(r) P_1 + f_2^\pm(r) Q P_3 + f_3^\pm(r) (1-Q) P_3$$

siendo  $f_i^\pm(r)$ ,  $i=1,2,3$ , funciones radiales a determinar;  $P^+$ ,  $P^-$ ,  $P_3$  y  $P_1$  proyectores sobre estados pares, impares, triplete y singlete de espín del sistema de dos nucleones, respectivamente; Q el proyector dado por (1.6).

Señalemos que el conjunto de los dos operadores

$$\{P_i\}_{i=1}^2 = \{Q, 1-Q\} \quad (1.20)$$

está integrado por proyectores mutuamente ortogonales sobre el espacio de funciones caracterizadas por los números cuánticos momento angular j, momentos de espín S=1 y de isoespín T, momento orbital l (OWE77):

$$\{P_i P_j - \delta_{ij} P_i\} |e, S=1 : j, T\rangle = 0 \quad (1.21)$$

Esto puede ser fácilmente comprobado a partir de la acción del proyector Q sobre las usuales funciones de espín-ángulo  $Y_{jse}$  o armónicos esféricos vectoriales (PRE75):

$$Y_{jse}^m = \sum_{m_e, m_s} c(s e j, m_s m_e) \delta_{s m_s} Y_{e m_e} = [\delta_s \times Y_e]_{j, m_e + m_s = m} \quad (1.22)$$

donde intervienen los coeficientes de Clebsh-Gordon usuales, dada

por

$$\begin{aligned}
 Q y_{i0j}^m &= 0 \\
 Q y_{jij}^m &= y_{jij}^m \\
 (2j+1) Q y_{j+1j}^m &= j y_{j+1j}^m + [j(j+1)]^{1/2} y_{j-1j}^m \\
 (2j+1) Q y_{j-1j}^m &= [j(j+1)]^{1/2} y_{j+1j}^m + (j+1) y_{j-1j}^m
 \end{aligned} \tag{1.23}$$

Las funciones  $f_1^{\pm}(\mathbf{r})$ , componentes de la correlación, serán determinadas, como ya dijimos en la introducción, a partir de un tratamiento variacional del estado fundamental de cada núcleo. Esto conducirá a la resolución de un conjunto de ecuaciones de Euler-Lagrange.

Todos estos resultados constituyen el contenido del apartado sexto de esta memoria, donde se especifican las condiciones adicionales que impondremos sobre  $F_2(i,j)$ .

### 1.3. Problema generalizado de valores propios.

Los estados físicos del sistema nuclear podrán ser expresados en la base correlacionada mediante combinaciones lineales del tipo

$$\sum_m C_m |\Psi_m\rangle \quad ; \quad |\Psi_m\rangle = F |\phi_m\rangle, \tag{1.24}$$

representando  $C_m$  las amplitudes de cada estado en la base correlacionada  $\{|\Psi_m\rangle\}$ .

Las energías y funciones de onda buscadas serán, por tanto, soluciones del problema generalizado de valores propios

$$\sum_m C_m \left\{ \langle \Psi_m | H | \Psi_n \rangle - E \langle \Psi_m | \Psi_n \rangle \right\} = 0, \quad \forall n \tag{1.25}$$

ya que como consecuencia de las correlaciones se tiene

$$\langle \Psi_m | \Psi_n \rangle \neq \delta_{m,n}. \tag{1.26}$$

Este problema tendrá solución  $\{C_m\}$  si y sólo si E satisface la ecuación secular

$$\det \left[ \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle - E \langle \psi_m | \psi_n \rangle \right] = 0. \quad (1.27)$$

Debido a la presencia del factor de correlación el cálculo de los elementos de matriz que aparecen en esta última ecuación supone la evaluación de integrales multidimensionales con integrandos no separables. La técnica de cálculo usada para resolver esta dificultad es la aplicación de una expansión en clusters. Esta permite separar las contribuciones sucesivas a los valores esperados por parte de uno, dos, tres, etc, cuerpos, pudiendo en consecuencia aproximar los elementos de matriz de A cuerpos en función de elementos de matriz de hasta n cuerpos,  $n \ll A$ .

En este trabajo haremos uso de expansiones de tipo multiplicativo o Van Kampen (KAM61), cuyas formas concretas tanto para elementos diagonales como no diagonales daremos posteriormente (apartado segundo de esta memoria). La serie expansiva será cortada en segundo orden ("lowest order", LO). Con el fin de asegurar la convergencia necesaria para que el cálculo LO tenga sentido, impondremos sobre el operador de correlación restricciones adicionales, tipo condición secuencial o, alternativamente, condición de Pauli. Todos estos resultados constituyen el contenido del apartado sexto de la presente memoria.

**2. EVALUAÇION DE ELEMENTOS DE MATRIZ EN LA BASE CORRELAÇIONADA.**

**2.0. Introducción.**

**2.1. Desarrollo FAHT.**

**2.1.1. Elementos diagonales.**

**2.1.2. Elementos no diagonales.**

**2.2. Desarrollo CIY.**

**2.2.1. Elementos diagonales.**

**2.2.2. Elementos no diagonales.**

## 2.0. Introducción.

Necesitamos calcular elementos de matriz de la forma

$$\langle \Psi_m | O_A | \Psi_n \rangle, \quad (2.1)$$

diagonales ( $m=n$ ) y no diagonales ( $m \neq n$ ), de un operador de A cuerpos

$$O_A(1, \dots, A) = \sum_{i=1}^A O_i(i) + \sum_{1 \leq i, j \leq A} O_{iz}(i, j) \quad (2.2)$$

entre los elementos

$$|\Psi_m\rangle = \frac{F|\phi_m\rangle}{\langle \phi_m | F + F | \phi_m \rangle} \quad (2.3)$$

de la base correlacionada, simbolizando  $i, j=1, \dots, A$  los observables fundamentales de cada partícula;  $|\phi_m\rangle$  los elementos de la base en la descripción del núcleo por el modelo de capas.

Como ya dijimos, la presencia del factor de correlación  $F$ , dado por (1.17)-(1.19), convierte la evaluación de (2.1) en una integración a A cuerpos con integrando no separable. Necesitamos, por tanto, hacer uso de un mecanismo de aproximación que permita expresar tal integral en términos de elementos de matriz de hasta  $n$  cuerpos,  $n \ll A$ , separando las contribuciones sucesivas por partes de uno, dos, tres... partículas.

La técnica de aproximación elegida ha sido la denominada "desarrollos en clusters" (FEE69). Estos se clasifican en dos grupos:

i) Desarrollos aditivos: tales como los IY de Iwamoto-Yamada (IWA57); AHT(Aviles-Hartogh-Tolhoek, AVI58, HAR58);

GGR(Gaudin-Gillespie-Ripka, GAU71), etc.

ii) Desarrollos multiplicativos. En este grupo se encuentran englobadas las dos expansiones que aplicaremos en nuestro trabajo: la FAHT (Factor-Aviles-Harttogh-Tolhoek), y la desarrollada por Clark et al., a partir de la FIY (Factor-Iwamoto-Yamada), y que denominaremos con las siglas CIY (Clark-Iwamoto-Yamada). Su desarrollo se halla pormenorizado en las referencias CLA68,79,81; RIS71; KRO79 y GUA81, tanto para elementos diagonales como no diagonales.

Comparaciones entre los diversos desarrollos y estudios sobre su convergencia se encuentran, por ejemplo, en AFN69 ; FAN72: CLA70,81; CIO80 y GUA79,80. Nosotros nos limitaremos a continuación a describir brevemente las líneas generales de tales desarrollos, dando sus correspondientes expresiones finales en segundo orden. Una teoría pormenorizada, con la deducción detallada de tales expresiones, se encuentra en las referencias indicadas.

Un desarrollo en clusters se empieza a construir definiendo las cantidades denominadas "integrales de subnormalización". Estas no son sino integrales a  $n$  cuerpos,  $1 \leq n \leq A$ , asociadas con cada subsistema de  $n$  partículas y, en general, respondiendo a la forma

$$I_n(\beta) \equiv I_{i_1, \dots, i_n}(\beta) = \langle \Psi_{i_1, \dots, i_n} | e^{\beta O_n(i_1, \dots, i_n)} | \Psi_{i_1, \dots, i_n} \rangle \quad (2.4)$$

$$| \Psi_{i_1, \dots, i_n} \rangle = F_n(i_1, \dots, i_n) | \phi_{i_1, \dots, i_n} \rangle \quad , \quad (2.5)$$

donde aparecen las funciones de onda correlacionadas del subsistema de  $n$  partículas,  $\Psi_{i_1, \dots, i_n}$ , y el operador de correlación  $F_n$  asociado, extraído de  $F(1, \dots, A)$  haciendo uso de la propiedad (1.16);  $\phi_{i_1, \dots, i_n}$  es la función de ondas no correlacionada construida eligiendo un conjunto de  $n$  orbitales  $|i_1\rangle, |i_2\rangle, \dots, |i_n\rangle$

del conjunto de los  $A$  disponibles;  $O_n(1, \dots, n)$  representa la restricción del operador  $O_A$  al espacio de Hilbert de las  $n$  partículas. Observemos que la forma de definición de estas integrales no es única para todos los desarrollos. Como veremos, por ejemplo, la FAHT arranca de una definición ligeramente diferente.

Estas integrales son simétricas en los  $n$  índices, de manera que se tendrán

$$\sum_{n=1}^A \binom{A}{n} = 2^A - 1 \quad (2.6)$$

integrales distintas, correspondientes a las distintas formas de seleccionar  $n$  orbitales de los  $A$  que definen el estado no correlacionado.

El cálculo de un valor esperado

$$\langle O_A \rangle = \langle \Psi_m | O_A | \Psi_m \rangle \quad (2.7)$$

puede generarse ahora mediante la expresión

$$\langle O_A \rangle = \frac{\partial}{\partial \beta} \ln I_A(\beta) \Big|_{\beta=0} \quad (2.8)$$

$$I_A(\beta) = \langle \Psi_{1, \dots, A} | e^{\beta O_A} | \Psi_{1, \dots, A} \rangle. \quad (2.9)$$

La tarea siguiente de cada expansión en clusters será proporcionar una regla de descomposición o mecanismo de extrapolación para las integrales de subnormalización, de manera que podamos extraer en los sucesivos órdenes  $n$ -ésimos de aproximación todas las contribuciones de los subsistemas de  $n$

partículas, despreciando las provenientes de los de un número mayor. Ya que las correlaciones, cuya presencia nos está obligando a realizar todo este proceso, las supondremos importantes sólo en un dominio pequeño del espacio de configuraciones (corto alcance), esperamos que los efectos debidos a  $n+1$  partículas sean menos importantes que los de  $n$  partículas, de forma que el método tenga una buena convergencia.

La regla de descomposición mencionada es la que particulariza y distingue cada expansión en clusters, y el que sea aditiva o multiplicativa es lo que nos permite clasificar los desarrollos en los dos grupos anteriormente mencionados. Sus ingredientes básicos se suelen denominar como "integrales clusters", y son definidos en cada expansión a partir de las integrales de subnormalización.

La generalización de todo el proceso para la evaluación de elementos de matriz no diagonales es laboriosa. A continuación expondremos brevemente el desarrollo FAHT para elementos diagonales, limitándonos, como ya dijimos, a dar las expresiones finales para sus elementos no diagonales y para el desarrollo CIY, indicando las referencias donde pueden encontrarse sus desarrollos pormenorizados.

### 2.1. Desarrollo FAHT.

En este desarrollo las integrales de subnormalización se definen como (CLA68,81)

$$J_n(\beta) = \frac{1}{\binom{A}{n}} \sum_{\langle i_1, \dots, i_n \rangle} I_{i_1, \dots, i_n}(\beta), \quad (2.10)$$

donde la suma corre sobre todas las particiones posibles de los  $A$  estados ocupados en subconjuntos de  $n$  estados. De esta manera, a las  $I_n(\beta)$  dadas por (2.4) las denominaremos ahora como "integrales

elementales", y las integrales de subnormalización representarán en este caso el valor medio del valor esperado del operador  $e^{\beta O_n}$  entre todos los subsistemas posibles de  $n$  partículas. En consecuencia, el valor medio del valor esperado del operador  $O_n$  entre todos estos subsistemas vendrá dado por

$$\langle O_n \rangle = \frac{J'_n(\beta)}{J_n(\beta)} \Big|_{\beta=0}, \quad (2.11)$$

donde con la prima simbolizamos la derivada primera respecto a  $\beta$ .

Se demuestra, de manera sencilla si se toman como funciones de onda determinantes de Slater contruidos con orbitales monoparticulares ortogonales, que estas integrales de subnormalización pueden expresarse como

$$J_n(\beta) = \langle \Psi_{1,\dots,A} | e^{\beta O_n(1,\dots,n)} | \Psi_{1,\dots,A} \rangle, \quad (2.12)$$

siendo  $\Psi_{1,\dots,A}$  la función del sistema de las  $A$  partículas.

Las integrales clusters se definen a continuación mediante la sucesiva aplicación de la expresión

$$J_n = \prod_{k=1}^n Y_k^{(n)}, \quad (2.13)$$

de tal forma que la ecuación  $n$ -ésima define la integral clusters  $Y_n$ , coincidiendo  $Y_1$  con  $J_1$  (si el operador careciese de parte a un cuerpo  $Y_2 = J_2$  sería la primera integral cluster a definir).

La última ecuación, para  $n=A$ , proporciona el valor  $J_A$  necesario para el cálculo del valor esperado :

$$\langle O_A \rangle = \frac{d}{d\beta} \ln J_A(\beta) \Big|_{\beta=0} \quad (2.14)$$

$$= \frac{d}{d\beta} \left( \prod_{k=1}^A Y_k^{(A)} \right) \Big|_{\beta=0} \quad (2.15)$$

$$= \sum_{k=0}^A \sum_{\ell=0}^{k-1} \binom{A}{k} \binom{k}{\ell} (-1)^\ell \frac{J_{k-\ell}'(\beta)}{J_{k-\ell}(\beta)} \Big|_{\beta=0} \quad (2.16)$$

$$= \sum_{k=0}^A \binom{A}{k} \frac{Y_k'}{Y_k(\beta)} \Big|_{\beta=0} \quad (2.17)$$

Cortar la expansión en orden  $n$ , o sea, realizar una aproximación en este orden, consiste en tomar  $Y_k$  como constante (con un valor unidad) para  $k > n$ , de forma que en la anterior suma (2.17) sólo contribuyen los términos con  $k \leq n$ .

De esta manera, en segundo orden la expansión se realizaría según:

$$\begin{aligned} J_1 &= Y_1 \\ J_2 &= Y_1^2 Y_2 \\ \dots \\ J_A &= Y_1^A Y_2^{\binom{A}{2}} \\ &= J_1^A \frac{J_2^{\binom{A}{2}}}{J_1^{2\binom{A}{2}}} \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} \langle O_A \rangle &= A \frac{Y_1'}{Y_1} + \binom{A}{2} \frac{Y_2'}{Y_2} \Big|_{\beta=0} \\ &= A \frac{J_1'}{J_1} + \binom{A}{2} \frac{J_2'}{J_2} - 2 \binom{A}{2} \frac{J_1'}{J_1} \Big|_{\beta=0} \\ &= A \frac{\langle \phi_{1,\dots,A} | F_1^+ O_1 F_1 | \phi_{1,\dots,A} \rangle}{\langle \phi_{1,\dots,A} | F_1^+ F_1 | \phi_{1,\dots,A} \rangle} \\ &\quad + \binom{A}{2} \left\{ \frac{\langle \phi_{1,\dots,A} | F_2^+ [O_1(1) + O_2(2) + O_{12}(1,2)] F_2 | \phi_{1,\dots,A} \rangle}{\langle \phi_{1,\dots,A} | F_2^+ F_2 | \phi_{1,\dots,A} \rangle} \right. \\ &\quad \left. - 2 \frac{\langle \phi_{1,\dots,A} | F_1^+ O_1 F_1 | \phi_{1,\dots,A} \rangle}{\langle \phi_{1,\dots,A} | F_1^+ F_1 | \phi_{1,\dots,A} \rangle} \right\}, \end{aligned} \quad (2.19)$$

donde  $|\phi_{1,\dots,A}\rangle$  representa la función de onda no correlacionada del sistema de las A partículas.

Hagamos un último comentario sobre el significado de las integrales clusters, antes de proceder a las restantes expresiones <sup>dar</sup> que usaremos en nuestro trabajo.

A partir de (2.13) podemos obtener las igualdades

$$\begin{aligned} \frac{J'_1}{J_1} \Big|_{\beta=0} &= \frac{Y'_1}{Y_1} \Big|_{\beta=0} \\ \frac{J'_2}{J_2} \Big|_{\beta=0} &= 2 \frac{Y'_1}{Y_1} \Big|_{\beta=0} + \frac{Y'_2}{Y_2} \Big|_{\beta=0} \\ \frac{J'_n}{J_n} \Big|_{\beta=0} &= \sum_{k=1}^n \binom{n}{k} \frac{Y'_k}{Y_k} \Big|_{\beta=0} \end{aligned} \quad (2.20)$$

e, invirtiéndolas,

$$\frac{Y'_n}{Y_n} \Big|_{\beta=0} = \frac{J'_n}{J_n} \Big|_{\beta=0} - \sum_{k=1}^{n-1} \binom{n}{k} \frac{Y'_k}{Y_k} \Big|_{\beta=0} \quad (2.21)$$

de forma que las cantidades  $\frac{Y'_k(\beta)}{Y_k(\beta)} \Big|_{\beta=0}$  que figuran en (2.15) se obtienen restando a los valores promediados esperados  $\frac{J'_k(\beta)}{J_n(\beta)} \Big|_{\beta=0}$  del operador de k cuerpos entre todos los posibles subsistemas de k partículas, las contribuciones provenientes de todos los subsistemas con un número de partículas inferior a k. Es decir, las  $Y_k$  aportan a la suma las contribuciones de k cuerpos, de forma que, debido al corto alcance de la correlación, es de esperar que

la convergencia, al cortar el desarrollo, sea buena, puesto que suponemos los efectos de  $k+1$  partículas menores que los de  $k$  partículas.

### 2.1.1. Elementos diagonales.

En nuestro caso, el operador  $O_A$  es el Hamiltoniano de los  $A$  cuerpos (1.1),

$$O_A \equiv H = \sum_{i=1}^A T(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq A} V(i,j), \quad (2.22)$$

y el operador de correlación carece de parte a un cuerpo,  $F(1)=1$ , de manera que, definido el operador efectivo  $H_{FAHT}^{eff}$  según

$$H_{FAHT}^{eff} = F_2(1,2) \left[ T(1) + T(2) + V(1,2) \right] F_2(1,2), \quad (2.23)$$

obtenemos en segundo orden:

$$N_{mm} = \langle \Psi_m | \Psi_m \rangle = 1 \quad (2.24)$$

$$\begin{aligned} H_{mm} &= \langle \Psi_m | H | \Psi_m \rangle \\ &= A \langle \phi_m | T(1) | \phi_m \rangle \\ &\quad + \left( \frac{A}{2} \right) \left\{ \frac{\langle \phi_m | H_{FAHT}^{eff} | \phi_m \rangle}{\langle \phi_m | F_2^2 | \phi_m \rangle} - 2 \langle \phi_m | T(1) | \phi_m \rangle \right\} \end{aligned} \quad (2.25)$$

### 2.1.2. Elementos no diagonales.

La extensión de la FAHT para elementos de matriz no diagonales lleva a las siguientes expresiones en segundo orden (GUA81):

$$\begin{aligned}
 N_{mn} &= \langle \psi_m | \psi_n \rangle \\
 &= \left( \frac{A}{2} \right) \frac{\langle \phi_m | F_2^2 | \phi_n \rangle}{[\langle \phi_m | F_2^2 | \phi_m \rangle \langle \phi_n | F_2^2 | \phi_n \rangle]^{1/2}} \quad (2.26)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 H_{mn} &= \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle \\
 &= \left( \frac{A}{2} \right) \frac{\langle \phi_m | H_{\text{FANT}}^{\text{eff}} | \phi_n \rangle}{[\langle \phi_m | F_2^2 | \phi_m \rangle \langle \phi_n | F_2^2 | \phi_n \rangle]^{1/2}} \\
 &\quad - \frac{1}{2} N_{mn} \left[ \frac{\langle \phi_m | H_{\text{FANT}}^{\text{eff}} | \phi_m \rangle}{\langle \phi_m | F_2^2 | \phi_m \rangle} + \frac{\langle \phi_n | H_{\text{FANT}}^{\text{eff}} | \phi_n \rangle}{\langle \phi_n | F_2^2 | \phi_n \rangle} \right] \\
 &\quad + \frac{1}{2} N_{mn} [H_{mm} + H_{nn}] \quad (2.27)
 \end{aligned}$$

## 2.2. Desarrollo CIY.

Las expresiones correspondientes a este desarrollo, en segundo orden, son las siguientes (CLA79,81; KRO79):

### 2.2.1. Elementos diagonales.

$$N_{mm} = \langle \psi_m | \psi_m \rangle = 1 \quad (2.28)$$

$$H_{mm} = \langle \psi_m | H | \psi_m \rangle = A \langle \phi_m | T(1) | \phi_m \rangle + \left( \frac{A}{2} \right) \langle \phi_m | V_{\text{CIY}}^{\text{eff}} | \phi_m \rangle \quad (2.29)$$

$$V_{\text{CIY}}^{\text{eff}} = \frac{1}{2} \left[ F_2(1,2) [T(1) + T(2), F_2(1,2)] \right] + F_2^2(1,2) V(1,2) \quad (2.30)$$

### 2.2.2. Elementos no diagonales.

$$N_{mn} = \langle \psi_m | \psi_n \rangle = \left( \frac{A}{2} \right) \langle \phi_m | F_2^2(1,2) | \phi_n \rangle \quad (2.31)$$

$$H_{mn} = \langle \psi_m | H | \psi_n \rangle = \left( \frac{A}{2} \right) \langle \phi_m | V_{\text{CIY}}^{\text{eff}} | \phi_n \rangle + \frac{1}{2} (H_{mm} + H_{nn}) N_{mn} \quad (2.32)$$

**3. CONSTRUCCION DE LA BASE NO CORRELACIONADA.**

Necesitamos calcular elementos de matriz de operadores efectivos a uno y dos cuerpos, proporcionados por las expansiones en clusters aplicadas, entre estados  $|\phi_m\rangle$  no correlacionados. Como tales estados tomaremos funciones antisimétricas con un cierto número de capas construidas a partir de los correspondientes orbitales monoparticulares. Estas funciones deberán poseer momentos totales angular  $J$ , isoespín  $T$  y paridad  $P$  bien definidos. En este apartado procederemos a su construcción explícita, introduciendo una notación gráfica que, como veremos, permitirá una visualización directa de todos los números cuánticos necesarios para determinar de manera completa cada elemento de la base.

Consideremos en primer lugar un estado de dos partículas. Este vendrá determinado por la especificación de los siguientes números cuánticos: momentos angulares  $j_1$  e isoespín  $t_1$  de cada partícula  $i$ ,  $i=1,2$ ; momentos totales  $J_{12}$  y  $T_{12}$ , angular y de isoespín, provenientes del acoplamiento respectivo de los anteriores, terceras componentes  $M_J, M_T$

$$|j_1, t_1; j_2, t_2 : J_{12}, M_J, T_{12}, M_T\rangle \quad (3.1)$$

Introduzcamos ahora la siguiente notación gráfica (BRU77, LAW80): representaremos el anterior estado como

$$| \begin{array}{c} j_1 t_1 \quad j_2 t_2 \\ \triangle \\ \xrightarrow{J_{12} T_{12} M_J M_T} \end{array} \rangle \quad (3.2)$$

indicando la punta de flecha el orden del acoplamiento. Si el estado de dos partículas está además antisimetrizado, lo señalaremos mediante un arco,

$$| \begin{array}{c} \triangle \\ |1t_1\rangle \quad |2t_2\rangle \\ \hline J_{12} T_{12} M_{12} M_{12} \end{array} \rangle \quad (3.3)$$

Las funciones asociadas a los estados  $|\phi_m\rangle$  integrantes de la base  $\{|\phi_m\rangle\}$  serán representados mediante esta notación, con la adecuada generalización.

Nuestro propósito es estudiar los núcleos ligeros de capa  $p$  del oscilador, con número másico  $5 \leq A \leq 16$ , y, según dijimos, escogemos como orbitales monoparticulares los correspondientes al modelo del oscilador armónico. Por tanto, y en el marco del modelo de capas, los nucleones se repartirán, en el caso sin excitaciones, entre las capas  $0s$  y  $0p$  del oscilador, completando siempre la primera. Partiendo de esta disposición, existirá un número infinito de situaciones posibles en las que distintos números de nucleones se promocionarán desde las capas  $0s$ ,  $0p$  hacia capas más altas, dando lugar, mediante los correspondientes acoplamientos, a distintas funciones de onda, o estados  $|\phi_m\rangle$ , con números cuánticos  $J$ ,  $T$  y  $P$  bien definidos.

En cada uno de los subespacios así generados (caracterizados por  $J$ ,  $T$  y  $P$ ), debemos proceder a resolver separadamente el correspondiente problema generalizado de valores propios (1.25). Es evidente que para que esto sea realizable debemos proceder a efectuar una truncación que haga que sus dimensiones se reduzcan a valores tratables numéricamente. En este trabajo consideraremos sólo aquellas funciones base  $|\phi_m\rangle$  obtenidas promocionando una o dos partículas desde la capa  $0p$  a las  $1s0d$ , con restricciones adicionales que se indicarán oportunamente para los casos en que aún esta truncación sea insuficiente, por dar lugar a dimensiones demasiado elevadas.

Consecuentemente, consideraremos tres clases posibles de funciones de onda para los estados base :

1) Funciones cero partícula-cero hueco (0p-0h).

En este caso, todas las partículas se encuentran situadas repartiéndose entre las capas 0s y 0p del oscilador, acoplando sus momentos para dar como resultado unos momentos totales  $J, T$ , terceras componentes respectivas  $M_J$  y  $M_T$ . Gráficamente, generalizando la notación antes introducida, representaremos el correspondiente estado antisimétrico como

$$|0p-0h\rangle_{A}^{JT} = 1 \quad \left( \begin{array}{c} \text{Diagrama de un triángulo inscrito en un círculo. El triángulo tiene vértices etiquetados como } (0s_{1/2})^4 \text{ en el vértice superior izquierdo, } (0p_{3/2})^{n_3} \text{ en el vértice superior derecho, y } (0p_{1/2})^{n_1} \text{ en el vértice inferior derecho. En el interior del triángulo se indican los momentos } J_3, T_3 \text{ y } J_1, T_1. Una línea diagonal divide el triángulo. Debajo del triángulo se indica } J, T. \end{array} \right) > (4+n_3+n_1=A) \quad (3.4)$$

donde han sido omitidas las terceras componentes (ya que no desempeñan ningún papel en el cálculo de las correspondientes energías), y simbolizando  $(n_1 j)^k$  la presencia de  $k$  partículas en la capa de oscilador caracterizada por los números cuánticos principal  $n$ , momentos orbital  $l$  y angular  $j$ ;  $J_i$  y  $T_i, i=1,3$ , los respectivos momentos intermedios angular y de isoespín necesarios para caracterizar completamente el estado, de paridad  $P$  dada por  $(-1)^{n_1+n_3}$ .

ii) Funciones una partícula-un hueco (1p-1h).

En este caso una partícula es promocionada desde una de las dos capas  $0p_j, j=1/2, 3/2$ , hasta una de las tres capas  $1s_{1/2}, 0d_{5/2}, 0d_{3/2}$ , de manera que basta identificar las capas origen y destino de tal partícula para, conjuntamente con la determinación del conjunto de números cuánticos adicionales que figuran en las funciones 0p-0h ya descritas, tener una descripción completa de

cada elemento de la base perteneciente a esta clase.

Gráficamente el símbolo asociado será

$$|1p-1h\rangle_A^{JT} = | \text{Diagram} \rangle (5+n_1+n_3 = A), \quad (3.5)$$

donde se ha simplificado representando por  $J_i$  la pareja de momentos  $J_i, T_i$ ;  $b$  representará la correspondiente capa de oscilador a que ha sido promocionada la partícula, caracterizada por los números cuánticos  $n_b, l_b$  y  $j_b$  ( $J_b = j_b, 1/2$ ).

iii) Funciones dos partículas-dos huecos ( $2p-2h$ ).

Ahora son dos las partículas que abandonan la capa  $0p$  para situarse en las  $1s0d$ . Por tanto, además de conocer las capas origen y destino de cada una de ellas y todos los números cuánticos adicionales mencionados para las otras funciones, necesitamos conocer los momentos a que se acoplan en su nueva situación. En la notación gráfica introducida el símbolo correspondiente será por tanto

$$|2p-2h\rangle_A^{JT} = | \text{Diagram} \rangle (b+n_1+n_3 = A) \quad (3.6)$$

Establecida la convención descrita, para cada núcleo a estudio (o sea, para cada valor de  $A$ ) tendremos que determinar todas las funciones  $|\phi_m\rangle$  que integran la base en cada subespacio de paridad  $P$  y momentos  $J, T$  bien definidos donde resolveremos, como ya dijimos, el problema generalizado de valores propios (1.25). Es

decir, tenemos que determinar todos los conjuntos de valores posibles para los distintos números cuánticos que especifican por completo cada función de ondas para unos  $P, J, T$  dados.

Determinadas la dimensión de cada subespacio y todas las funciones a él pertenecientes, el paso siguiente a realizar es el cálculo de los elementos de matriz entre ellos de los operadores efectivos a uno y dos cuerpos proporcionados por las expansiones en clusters al segundo orden. Esta tarea constituye el contenido de los siguientes apartados.

4. ELEMENTOS DE MATRIZ ENTRE FUNCIONES DE LA BASE NO CORRELACIONADA:  
REDUCCION A ELEMENTOS DE MATRIZ DE DOS PARTICULAS.

Necesitamos calcular elementos de matriz de las formas generales

$$\begin{aligned} & \langle 0_p - 0_h | \hat{O} | 0_p - 0_h \rangle_A \\ & \langle 1_p - 1_h | \hat{O} | 1_p - 1_h \rangle_A \\ & \langle 2_p - 2_h | \hat{O} | 2_p - 2_h \rangle_A \\ & \langle 0_p - 0_h | \hat{O} | 2_p - 2_h \rangle_A \end{aligned} \quad , \quad (4.1)$$

entre las funciones  $|\phi_m\rangle$  anteriormente construidas, representado  $\hat{O}$  los correspondientes operadores efectivos proporcionados por las expansiones en clusters aplicadas, y que aquí consideraremos en general como respondiendo a la expresión

$$\hat{O} = \sum_{i=1}^A \hat{O}_1(i) + \sum_{1 \leq i < j \leq A} \hat{O}_{12}(i,j) \quad . \quad (4.2)$$

Observemos que, debido a la conservación de la paridad, no se presentarán, evidentemente, elementos de matriz de las formas

$$\begin{aligned} & \langle 0_p - 0_h | \hat{O} | 1_p - 1_h \rangle_A \\ & \langle 1_p - 1_h | \hat{O} | 2_p - 2_h \rangle_A \end{aligned} \quad . \quad (4.3)$$

Por lo que respecta a la parte a un cuerpo  $\hat{O}_1(i)$ ,  $i=1,2,\dots,A$ , de expresión concreta en nuestro caso dada por

$$\begin{aligned} \hat{O}_1(i) &= T(i) \\ T(i) &= \frac{P^2(i)}{2m} \end{aligned} \quad , \quad (4.4)$$

la elección hecha de orbitales monoparticulares como los del oscilador armónico, permite el cálculo de sus elementos de matriz entre los estados de la base,

$$\langle \phi_m | \sum_{i=1}^A \hat{O}_1(i) | \phi_m \rangle \quad , \quad (4.5)$$

mediante la aplicación del teorema del virial, válido para los elementos diagonales que serán los únicos que den contribución no nula a la energía. Esto nos conduce a su expresión como suma de las energías monoparticulares asociadas a los orbitales del oscilador ocupados:

$$\langle \phi_m | \sum_{i=1}^A T(i) | \phi_m \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A \epsilon_i \quad (4.6)$$

$$\sum_{i=1}^A \langle i | T(i) | i \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A \epsilon_i$$

$$H_{H.O.} |i\rangle = (T(i) + \frac{1}{2} m \omega^2 r_i^2) |i\rangle = \epsilon_i |i\rangle \quad (4.7)$$

Si caracterizamos cada orbital  $|i\rangle$  del oscilador por los números cuánticos principal  $n_i$  y de momento orbital  $l_i$ , esta energía  $\epsilon_i$  vendrá dada por

$$|i\rangle \equiv |n_i, l_i\rangle, \quad n_i = 0, 1, 2, \dots \quad (4.8)$$

$$\epsilon_i = (2n_i + l_i + 3/2) \hbar \omega \quad (4.9)$$

donde  $\hbar \omega$  representa el parámetro usual del oscilador, expresándose su valor en MeV.

La parte a dos cuerpos ha sido calculada consiguiendo la expresión de los correspondientes elementos de matriz como suma de elementos de dos partículas exclusivamente,

$$\left\langle \begin{array}{c} \textcircled{0,2} \\ \rho \quad \lambda \\ \hline J_{11} T_{11} \end{array} \right| \hat{O}_{12}(1,2) \left| \begin{array}{c} \textcircled{0,2} \\ \sigma \quad \mu \\ \hline J_{12} T_{12} \end{array} \right\rangle \quad (4.10)$$

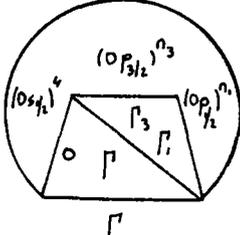
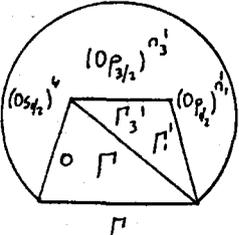
simbolizando  $\rho$ ,  $\lambda$ ,  $\sigma$  y  $\mu$  las distintas capas de oscilador presentes.

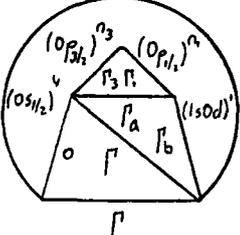
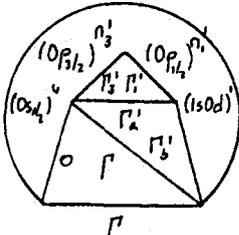
A continuación analizaremos detalladamente este proceso de reducción.

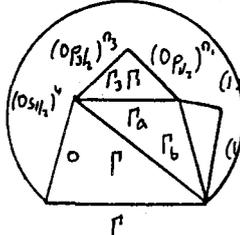
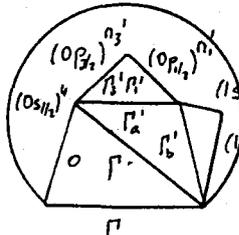
Queremos expresar, en el caso más general, los elementos de matriz de un operador a dos cuerpos de la forma

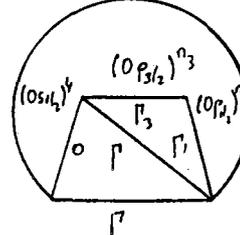
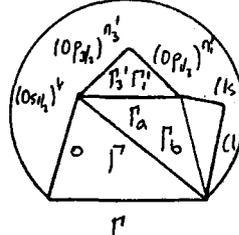
$$\hat{O}_{12} = \sum_{1 \leq i < j \leq A} O_{12}(i,j) \quad (4.11)$$

entre funciones de onda de varias capas como suma de elementos de matriz a dos cuerpos (4.10). Concretamente, necesitaremos expresiones de este tipo para elementos de las siguientes clases:

1.   $\left| \sum_{1 \leq i < j \leq A} O_{12}(i,j) \right|$   (4.12)

2.   $\left| \sum_{1 \leq i < j \leq A} O_{12}(i,j) \right|$   (4.13)

3.   $\left| \sum_{1 \leq i < j \leq A} O_{12}(i,j) \right|$   (4.14)

4.   $\left| \sum_{1 \leq i < j \leq A} O_{12}(i,j) \right|$   (4.15)

La reducción ha sido llevada a cabo realizando las sucesivas etapas (BIE65; GLA64; BRU77; LAW80):

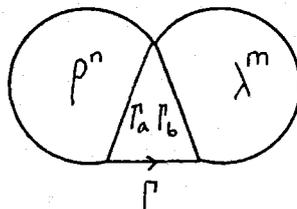
i) Separar la acción del operador en sumandos que afecten solamente a una y dos capas, mediante el uso del adecuado operador de antisimetrización.

ii) Efectuar la integración sobre las coordenadas de las partículas no afectadas en cada sumando.

iii) Aplicar el correspondiente álgebra de Racah que, con el uso de coeficientes de parentesco fraccional, permite llegar al resultado buscado.

A continuación daremos algunos ejemplos que mostrarán el desarrollo de tales etapas. Los resultados finales obtenidos aplicándolas a la reducción de las cuatro clases de elementos anteriormente mencionados constituyen el contenido del apéndice A. Se ha omitido su proceso de cálculo debido a que, en esencia, constituye un proceso repetitivo y, por otra parte, de gran extensión. Los ejemplos que pormenorizamos a continuación serán suficientes para ilustrarlo.

Comencemos especificando cual será el operador de antisimetrización al que hacemos referencia en i). Para ello, consideremos una función de onda de dos capas  $\rho, \lambda$  en la que se hallen antisimetrizadas por separado las partes correspondientes a cada una de ellas,



(4.16)

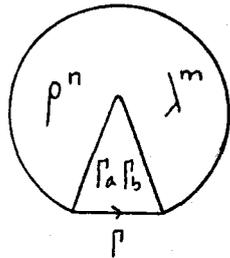
ocupadas, respectivamente, por  $n$  y  $m$  partículas.

El operador de antisimetrización para el grupo simétrico  $S_k$ , correspondiente a  $k$  partículas, viene dado por (BRU77)

$$A_k = \frac{1}{\sqrt{k!}} \sum_P \varepsilon_P P \quad (4.17)$$

simbolizando  $P$  las distintas permutaciones de las  $k$  partículas y  $\varepsilon_P$  la correspondiente fase.

Bastaría, por tanto, aplicar el correspondiente operador sobre (4.16) para generar funciones antisimetrizadas globalmente en las  $n+m$  partículas,



$$(4.18)$$

El problema se simplifica si clasificamos las  $(n+m)!$  permutaciones de  $S_{n+m}$  en grupos integrados por elementos que produzcan el mismo efecto sobre el estado de partida. Para ello se introduce el concepto de "permutaciones que conservan el orden" ("order preserving permutations", O.P.P.), asociadas a una partición de las  $(n+m)$  partículas en dos conjuntos integrados, respectivamente, por  $n$  y  $m$  partículas. Su definición es la siguiente: diremos que una permutación entre las  $n+m$  partículas es una O.P.P. si i) intercambia partículas entre cada subconjunto de  $n$  y  $m$  partículas, ii) ambos subconjuntos quedan ordenados (respecto a una adjudicación de índices inicial, llevada a cabo antes de aplicar la permutación). A ellas agregaremos la identidad, la cual consideraremos también como una O.P.P. La introducción de las O.P.P. divide las  $(n+m)!$  permutaciones en clases de equivalencia constituidas por una O.P.P. y todas las restantes que produzcan el

mismo efecto, o sea, las deducidas de aquélla permutando entre sí separadamente los índices pertenecientes a los dos conjuntos de  $n$  y  $m$  partículas.

El número total de O.P.P. es

$$\binom{n+m}{n} = \frac{(n+m)!}{n! m!} \quad (4.19)$$

y, si definimos el operador

$$B_{n+m} = \left[ \frac{n! m!}{(n+m)!} \right]^{1/2} \sum_{\text{O.P.P.}} \epsilon_P P, \quad (4.20)$$

podemos obtener finalmente

$$\left( \text{Diagram} \right) = \left[ \frac{n! m!}{(n+m)!} \right]^{1/2} \sum_{\text{O.P.P.}} \epsilon_P P \left( \text{Diagram} \right) \quad (4.21)$$

La generalización de este proceso para funciones de onda de varias capas, inmediata, nos permitirá la obtención de los elementos de matriz buscados. A continuación desarrollaremos un ejemplo.

Supongamos que queremos efectuar la reducción a elementos de matriz de dos cuerpos del siguiente elemento :

$$\langle O \rangle = \left\langle \left( \text{Diagram} \right) \right\rangle = \sum_{1 \leq i, j, s, A} O(i, j) \left( \text{Diagram} \right) \quad (4.22)$$

$$A = k + n + m$$

$$\alpha \equiv j_\alpha; t_\alpha \quad (\alpha \equiv a, a', b, b', d, d', e, e', c) \quad (4.23)$$

Su cálculo se desarrollará a través de las etapas indicadas

anteriormente de la siguiente manera:

$$\langle O \rangle = \sqrt{\frac{k!(n+m)!}{(k+n+m)!}} \left\langle \sum_{O.P.P.} \epsilon_P P \right. \left. \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \sum_{i|j} O_{ij} \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \quad (4.24)$$

donde  $P_1$  es una O.P.P. correspondiente al intercambio de partículas, en la función de ondas de la izquierda, entre la capa  $\sigma$ , de un lado, y las  $\rho$  y  $\lambda$ , del otro. La función de onda de la derecha en la anterior expresión es totalmente antisimétrica, mientras que el operador es totalmente simétrico (en todas las partículas). En consecuencia, todos los términos de la suma contribuirán por igual y, por tanto, tendremos

$$\begin{aligned} \langle O \rangle &= \sqrt{\frac{(k+n+m)!}{k!(n+m)!}} \left\langle \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \sum_{i|j} O_{ij} \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \\ &= \left\langle \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \sum_{i|j} O_{ij} \sum_{O.P.P.} \epsilon_{P_2} P_2 \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle, \quad (4.25) \end{aligned}$$

con  $P_2$  de significado análogo a  $P_1$ , pero ahora para la función de onda de la izquierda. Separando a continuación la acción del operador por capas:

$$\langle O \rangle = \left\langle \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \sum_{\substack{i|j \\ c \sigma}} O_{ij} + \sum_{\substack{i|j \\ e \rho, \lambda}} O_{ij} + \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \rho} O_{ij} \sum_{O.P.P.} \epsilon_{P_2} P_2 \left( \begin{array}{c} \sigma^k \quad \rho^n \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \quad (4.26)$$

$$= \langle O_1 \rangle + \langle O_2 \rangle + \langle O_3 \rangle ,$$

correspondiendo cada uno de los tres símbolos en la última línea, respectivamente, a los valores esperados de cada uno de los tres sumandos en que hemos separado la acción del operador. Vamos a evaluar cada uno de ellos por separado, identificando las O.P.P.  $\{P_2\}$  que darán contribución no nula en cada caso y efectuando las correspondientes integraciones sobre las coordenadas de las partículas no afectadas en cada sumando, de forma que obtendremos:

$$\langle O_1 \rangle = \left\langle \left( \sum_{i,j \in \sigma} O_{ij} \right) \left( \sum_{a,r,r'} \epsilon_{r,r'} P_r \right) \right\rangle \quad (4.27)$$

Cualquier permutación, salvo la identidad, intercambiaría partículas entre las capas  $\sigma$  y las  $\rho, \lambda$  en la función de la derecha. Como el operador afecta exclusivamente a las partículas en la capa  $\sigma$ , es decir, con índice  $\leq k$ , al efectuar la integración sobre las coordenadas de las partículas no afectadas por él tendríamos una anulación por ortogonalidad provocada por las partículas desplazadas de capa, respecto de su situación en la función de ondas de la izquierda. Por tanto, la única permutación que contribuye a la suma es la identidad, y si integramos las coordenadas de las partículas de índices  $k+1, \dots, k+n+m$ , obtendremos el resultado

$$\langle O_1 \rangle = \langle \left( \text{Diagram: semi-circle with } \sigma^k \text{ and } a \right) \Big| \sum_{1 \leq i < j \leq k} O_{ij} \Big| \left( \text{Diagram: semi-circle with } \sigma^k \text{ and } a \right) \rangle_{\int_{b,b'} \int_{d,d'} \int_{e,e'}} \quad (4.28)$$

Análogamente,

$$\begin{aligned} \langle O_2 \rangle &= \langle \left( \text{Diagram: circle with } \rho^n, \lambda^m, b, d, e \right) \Big| \sum_{k+n \leq i < j \leq k+n+m} O_{ij} \Big| \left( \text{Diagram: circle with } \rho^n, \lambda^m, b', d', e \right) \rangle_{\int_{e,e'} \int_{a,a'}} \\ &= \langle \left( \text{Diagram: circle with } \rho^n, \lambda^m, b, d, e \right) \Big| \sum_{\substack{i < j \\ e, \lambda}} O_{ij} + \sum_{\substack{i < j \\ e, \rho}} O_{ij} + \sum_{\substack{i \in \rho \\ j \in \lambda}} O_{ij} \Big| \sum_{\substack{\mathcal{P}_3 \\ \text{O.P.P.}}} \mathcal{E}_{\mathcal{P}_3} \left( \text{Diagram: circle with } \rho^n, \lambda^m, b', d', e \right) \rangle_{\int_{e,e'} \int_{a,a'}} \end{aligned} \quad (4.29)$$

donde ahora  $\mathcal{P}_3$  corresponderá a las permutaciones O.P.P. que intercambian partículas entre las capas  $\rho$  y  $\lambda$  en la función de ondas de la derecha, obteniéndose:

$$\langle O_2 \rangle = \langle O_{2_1} \rangle + \langle O_{2_2} \rangle + \langle O_{2_3} \rangle \quad (4.30)$$

$$\langle O_{2_1} \rangle = \langle \left( \text{Diagram: semi-circle with } \rho^n \text{ and } b \right) \Big| \sum_{k+n \leq i < j \leq k+n} O_{ij} \Big| \left( \text{Diagram: semi-circle with } \rho^n \text{ and } b \right) \rangle_{\int_{b,b'} \int_{d,d'} \int_{e,e'} \int_{a,a'}} \quad (4.31)$$

$$\langle O_{2_2} \rangle = \langle \left( \text{Diagram: semi-circle with } \lambda^m \text{ and } d \right) \Big| \sum_{k+n \leq i < j \leq k+n+m} O_{ij} \Big| \left( \text{Diagram: semi-circle with } \lambda^m \text{ and } d \right) \rangle_{\int_{b,b'} \int_{d,d'} \int_{e,e'} \int_{a,a'}} \quad (4.32)$$

$$\langle O_{2_3} \rangle = \langle \left( \text{Diagram: circle with } \rho^n, \lambda^m, b, d, e \right) \Big| \sum_{i \in \rho} \sum_{j \in \lambda} O_{ij} \Big| \sum_{\text{O.P.P.}} \mathcal{E}_{\mathcal{P}_3} \left( \text{Diagram: circle with } \rho^n, \lambda^m, b', d', e \right) \rangle_{\int_{e,e'} \int_{a,a'}} \quad (4.33)$$

Evidentemente, sólo dos O.P.P. contribuyen en el último sumando: la identidad y la trasposición de una partícula entre ambas capas, teniéndose que el par de partículas desplazadas en la función de la derecha, respecto su posición en la función de la izquierda, ha de ser afectado por el operador a fin de evitar anulación por ortogonalidad. En consecuencia, podemos expresar  $\langle O_2 \rangle$  como

$$\langle O_2 \rangle = \left\langle \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ b \quad d \\ e \end{array} \right) \left| \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \lambda} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ b' \quad d' \\ e \end{array} \right) \right\rangle \quad (4.34)$$

Por último, tendremos:

$$\begin{aligned} \langle O_3 \rangle &= \left\langle \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \left| \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \rho, \lambda} O_{ij} \left| \sum_{\text{o.p.p.}} \mathcal{E}_2 P_2 \right. \right. \right| \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \\ &= \left\langle \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \left| \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \rho, \lambda} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right. \right| \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \\ &= \left\langle \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \left| \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \rho, \lambda} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \sum_{\text{o.p.p.}} \mathcal{E}_3 P_3 \right. \right. \right| \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \\ &= \sum_{i=1,2} \sum_{j=3} \langle O_i \rangle = \left\langle \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a \quad e \quad b \quad d \\ c \end{array} \right) \left| \left( \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \rho} + \sum_{j \in \lambda} \right) O_{ij} (1 - P_{ij}) \right. \right| \left( \begin{array}{c} \rho^n \quad \lambda^m \\ a' \quad e' \quad b' \quad d' \\ c \end{array} \right) \right\rangle \quad (4.35) \end{aligned}$$

La siguiente etapa a realizar será aplicar, a continuación, el adecuado álgebra de Racah, con la introducción de coeficientes de parentesco fraccional. De esta manera, expresaremos finalmente  $\langle 0_1 \rangle$ ,  $\langle 0_{2_i} \rangle$  ( $i=1,2,3$ ), y  $\langle 0_{3_i} \rangle$  ( $i=1,2$ ), como suma de elementos de matriz a dos cuerpos. Como ejemplo, vamos a desarrollar la reducción correspondiente al último sumando,  $\langle 0_{3_2} \rangle$ :

$$\begin{aligned}
 \langle 0_{3_2} \rangle &= \left\langle \begin{array}{c} \text{p}^n \\ \sigma^k \quad b \quad \lambda^m \\ a \quad e \quad d \\ c \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \lambda} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \left\langle \begin{array}{c} \text{p}^n \\ \sigma^k \quad b' \quad \lambda^m \\ a' \quad e' \quad d' \\ c \end{array} \right\rangle \\
 &= (-1)^{b+d-e} (-1)^{b'+d'-e'} \sum_{\omega_1, \omega_2} U(adcb; \omega_1 e) U(ad'c'b'; \omega_2 e') \tag{4.36}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \int_{b, b'} \int_{\omega_1, \omega_2} \left\langle \begin{array}{c} \sigma^k \quad \lambda^m \\ a \quad d \\ \omega_1 \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i \in \sigma} \sum_{j \in \lambda} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \left\langle \begin{array}{c} \sigma^k \quad \lambda^m \\ a' \quad d' \\ \omega_2 \end{array} \right\rangle \\
 &= (-1)^{2b+d+d'-e-e'} \int_{b, b'} \int_{\omega_1, \omega_2} \sum_{k, m} U(adcb; \omega_1 e) U(ad'c'b'; \omega_2 e').
 \end{aligned}$$

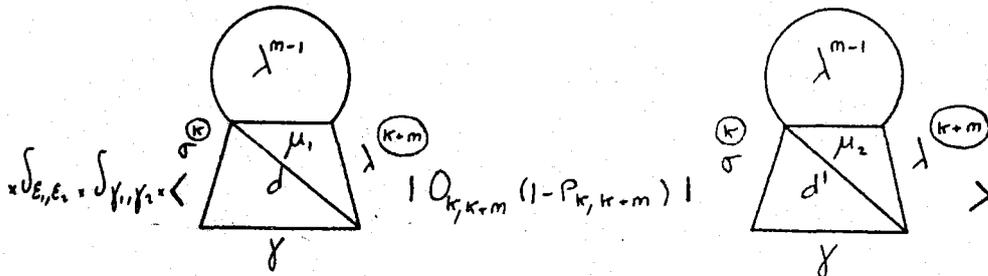
$$\begin{aligned}
 & \times \left\langle \begin{array}{c} 1, 2, \dots, k \quad k+1, \dots, k+m \\ \sigma^k \quad \lambda^m \\ a \quad d \\ \omega \end{array} \right\rangle \left| O_{k, k+m} (1 - P_{k, k+m}) \right| \left\langle \begin{array}{c} 1, 2, \dots, k \quad k+1, \dots, k+m \\ \sigma^k \quad \lambda^m \\ a' \quad d' \\ \omega \end{array} \right\rangle \\
 &= (-1)^{2b+d+d'-e-e'} \int_{b, b'} \int_{\omega_1, \omega_2} \sum_{k, m} U(adcb; \omega_1 e) U(ad'c'b'; \omega_2 e') \sum_{\epsilon_1, \epsilon_2} \langle (\sigma)^k : a | (\sigma)^{k-1} : \epsilon_i \rangle.
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \times \langle (\sigma)^k : a | (\sigma)^{k-1} : \epsilon_i \rangle \left\langle \begin{array}{c} \sigma^{\otimes k} \\ \sigma^{k-1} \quad \epsilon_i \quad \lambda^m \\ a \quad d \\ \omega \end{array} \right\rangle \left| O_{k, k+m} (1 - P_{k, k+m}) \right| \left\langle \begin{array}{c} \sigma^{\otimes k} \\ \sigma^{k-1} \quad \epsilon_2 \quad \lambda^m \\ a' \quad d' \\ \omega \end{array} \right\rangle
 \end{aligned}$$

$$= (-1)^{2b+d+d'-e-e'} \int_{b,b'} \cdot k \cdot m \cdot \sum_{\omega} U(adcb; \omega e) U(ad'cb; \omega e').$$

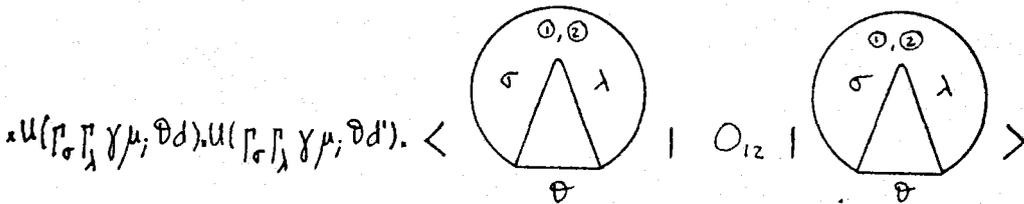
$$\cdot \sum_{\varepsilon_1, \varepsilon_2} \langle (\sigma)^k : a | (\sigma)^{k-1} : \varepsilon_1 \rangle \langle (\sigma)^k : a' | (\sigma)^{k-1} : \varepsilon_2 \rangle \cdot \sum_{\gamma_1, \gamma_2} U(\varepsilon_1 \rho_{\sigma} \omega d; a \gamma_1).$$

$$\cdot U(\varepsilon_2 \rho_{\sigma} \omega d'; a' \gamma_2) \cdot \sum_{\mu_1, \mu_2} \langle (\lambda)^m : d | (\lambda)^{m-1} : \mu_1 \rangle \langle (\lambda)^m : d' | (\lambda)^{m-1} : \mu_2 \rangle.$$



$$= (-1)^{2b+d+d'-e-e'} \int_{b,b'} \cdot k \cdot m \cdot \sum_{\omega \varepsilon \gamma \mu \vartheta} \langle (\sigma)^k : a | (\sigma)^{k-1} : \varepsilon \rangle \langle (\sigma)^k : a' | (\sigma)^{k-1} : \varepsilon \rangle.$$

$$\cdot \langle (\lambda)^m : d | (\lambda)^{m-1} : \mu \rangle \langle (\lambda)^m : d' | (\lambda)^{m-1} : \mu \rangle \cdot U(adcb; \omega e) U(ad'cb; \omega e') \cdot (-1)^{2\mu+2\rho-d-d'}.$$



donde

(4.37)

$$\rho_{\alpha} \equiv (j_{\alpha}, t_{\alpha}), \quad t_{\alpha} = 1/2, \quad \alpha \equiv \sigma, \lambda;$$

$$\alpha \equiv (j_{\alpha}, t_{\alpha}), \quad \alpha \equiv \gamma, \mu, \omega, \varepsilon, \vartheta, a, a', b, b', d, d', c;$$

$$(-1)^{\alpha} = (-1)^{j_{\alpha}} \cdot (-1)^{t_{\alpha}}$$

$$U(\alpha \beta \gamma \varepsilon; \theta \Omega) = U(j_{\alpha} j_{\beta} j_{\gamma} j_{\varepsilon}; j_{\theta} j_{\Omega}) \cdot U(t_{\alpha} t_{\beta} t_{\gamma} t_{\varepsilon}; t_{\theta} t_{\Omega});$$

(4.38)

$\langle (\rho)^n : \alpha | (\rho)^{n-1} : \beta \rangle$  representa el coeficiente de parentesco fraccional de  $n$  partículas en capa  $\rho$ , acopladas a  $\alpha$ , yendo a  $n-1$  partículas acopladas a  $\beta$ ;  $\alpha$  y  $\beta$  notan todos los números cuánticos necesarios

para identificar por completo el correspondiente estado.

Como último comentario, observemos que hemos supuesto que las partículas se encontraban, en las funciones de partida a derecha e izquierda, igualmente repartidas entre las diversas capas. No siempre será así, lo mismo que no será siempre igual el número de capas en las dos funciones. Todas las distintas posibilidades que se nos presentan, resumidas en las expresiones (4.12) - (4.15), comportarán procesos ligeramente diferentes al anteriormente descrito, sobre todo a la hora de contar las O.P.P. que contribuyen en cada suma. Los resultados para cada caso, como dijimos, constituyen el contenido del apéndice A.

5. POTENCIAL EFECTIVO Y ELEMENTOS DE MATRIZ DE DOS PARTICULAS.

5.0. Introducción.

5.1. Determinación del potencial efectivo.

5.1.0. Introducción.

5.1.1. Término asociado a la energía potencial.

5.1.2. Término asociado a la energía cinética.

5.1.3. Término asociado a la energía total.

5.1.4. Término asociado a la norma.

5.2. Cálculo de los elementos de matriz del potencial efectivo entre los estados de dos partículas.

5.2.1. Componentes centrales, tensoriales y espín-órbita para el potencial efectivo  $Q_{IY}$ .

5.2.2. Término adicional para la PAHT.

### 5.0. Introducción.

Necesitamos calcular elementos de matriz de dos cuerpos de expresión general:

$$\left\langle \begin{array}{c} \sigma \quad \rho \\ \triangle \\ JT \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \mu \quad \nu \\ \triangle \\ JT \end{array} \right\rangle, \quad (5.1)$$

simbolizando  $\sigma$ ,  $\rho$ ,  $\mu$  y  $\nu$  distintas capas del oscilador; J, T los momentos angulares total y de isoespín resultantes del acoplamiento de los correspondientes a cada partícula;  $O_{12}$  es el correspondiente operador efectivo dado por las expansiones en clusters.

Para efectuar su cálculo seguiremos los siguientes pasos:

- i) Determinación de la forma del potencial efectivo como una expresión general del tipo (1.8).
- ii) Introducción en el elemento de matriz y cálculo del mismo.

### 5.1. Determinación del potencial efectivo

#### 5.1.0. Introducción.

La aplicación de las expansiones en clusters expuestas en el apartado segundo de esta memoria nos ha proporcionado los siguientes operadores efectivos:

$$CIY: V_{CIY}^{eff} = \frac{1}{2} \left[ F_2(1,2) [T(1) + T(2), F_2(1,2)] \right] + F_2^2(1,2) V(1,2) \quad (5.2)$$

$$FAHT: H_{FAHT}^{eff} = F_2(1,2) (T(1) + T(2) + V(1,2)) F_2(1,2), \quad (5.3)$$

obtenidos a partir de las expresiones generales de la interacción  $V(1,2)$  y la función de correlación  $F_2(1,2)$  del subsistema de dos

cuerpos, dadas respectivamente por:

$$\begin{aligned}
 V(1,2) = & V_c^{01}(r) P_1 P^+ + V_c^{00}(r) P_1 P^- + V_c^{10}(r) P_3 P^+ + V_c^{11}(r) P_3 P^- \\
 & + V_T^{10}(r) S_{12} P_3 P^+ + V_T^{11}(r) S_{12} P_3 P^- \\
 & + V_{L_3}^{10}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^+ + V_{L_3}^{11}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^-
 \end{aligned} \quad (5.4)$$

$$F_2(1,2) = F^+(1,2) P^+ + F^-(1,2) P^- \quad (5.5)$$

$$F^\pm(1,2) = f_1^\pm(r) P_1 + f_2^\pm(r) Q P_3 + f_3^\pm(r) (1-Q) P_3 \quad (5.6)$$

una vez descompuesta su acción en canales espín-isoespín (S-T).

Respecto al potencial  $V(1,2)$ , la elección hecha del mismo como potencial de Reid soft-core V-8 (o cualquier otra similar que hiciéramos) nos determinaría las distintas funciones radiales  $V^{ST}(r)$  que aparecen en su expresión.

Por lo que respecta a  $F_2(1,2)$  no tenemos determinadas las funciones  $f_i^\pm(r)$ ,  $i=1,2,3$ , que aparecen en su expresión. Como ya hemos dicho, esta tarea se hará a través de un tratamiento variacional de la energía del estado fundamental, el cual constituye el apartado sexto de la presente memoria. Aquí nos limitaremos a suponer que son funciones radiales perfectamente conocidas y que, al igual que las anteriores  $V^{ST}(r)$ , han de ser introducidas en las expresiones de los operadores efectivos.

Entre los dos operadores efectivos anteriores (5.2) y (5.3) existe la siguiente relación:

$$H_{\text{FAHT}}^{\text{eff}} = V_{\text{CTV}}^{\text{eff}} + \frac{1}{2} F_2^2(1,2) (T(1) + T(2)) + \frac{1}{2} (T(1) + T(2)) F_2^2(1,2). \quad (5.7)$$

Ya que hemos elegido la parte espacial de los orbitales monoparticulares como la de los orbitales del oscilador armónico, el valor esperado del segundo sumando en la anterior expresión será

de fácil evaluación. Nos limitaremos, pues, a obtener la expresión del potencial efectivo  $V_{FIY}$ , calculando los valores esperados para el operador  $H_{FAHT}^{eff}$  a partir de los correspondientes a aquél mediante la anterior relación.

Veamos, pues, como podemos expresar  $V_{FIY}^{eff}$  en componentes por canales espín-isoespín, de manera análoga a como viene dado el potencial  $V(1,2)$  en (5.4). Para ello, trataremos por separado cada uno de los dos sumandos en (5.2), que denominaremos respectivamente como asociados a las energías cinética y potencial. En este apartado se darán sólo las nociones de como se ha llevado a efecto su cálculo. El proceso detallado de obtención constituye el contenido del apéndice B. Incluimos también la expresión resultante para el operador  $F_2(1,2)$ , necesaria para el cálculo.

### 5.1.1. Término asociado a la energía potencial.

$$\begin{aligned} V_{CIY}^{eff} &= F_2(1,2) V(1,2) F_2(1,2) \\ &= [f_1^+ P_1 + f_2^+ P_3 Q + f_3^+ P_3 (1-Q)] [V_c^{00} P_1 + V_c^{10} P_3 + V_T^{10} S_{12} P_3 + V_{LS}^{10} \bar{L} \bar{S} P_3] [f_1^+ P_1 + f_2^+ P_3 Q + f_3^+ P_3 (1-Q)] P^+ \\ &\quad + [f_1^- P_1 + f_2^- P_3 Q + f_3^- P_3 (1-Q)] [V_c^{00} P_1 + V_c^{10} P_3 + V_T^{10} S_{12} P_3 + V_{LS}^{10} \bar{L} \bar{S} P_3] [f_1^- P_1 + f_2^- P_3 Q + f_3^- P_3 (1-Q)] P^- \end{aligned} \quad (5.8)$$

Para desarrollar esta expresión haremos uso de los resultados:

$$\begin{aligned} P_3 Q S_{12} Q &= \frac{1}{3} P_3 S_{12} + \frac{4}{3} P_3 & P_3 (1-Q) S_{12} (1-Q) &= \frac{2}{3} P_3 S_{12} - \frac{4}{3} P_3 \\ Q \bar{L} \bar{S} Q &= -\frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 & Q \bar{L} \bar{S} + \bar{L} \bar{S} Q &= -\frac{1}{2} S_{12} + \bar{L} \bar{S} \end{aligned} \quad (5.9)$$

que, sustituidos en la misma, conducen al resultado (ver apéndice B, apartados 1 y 2):

$$\begin{aligned} V_{CIY}^{eff} &= V_c^{00} (f_1^+)^2 P_1 P^+ + V_c^{00} (f_1^-)^2 P_1 P^- \\ &\quad + \left[ \left( \frac{2}{3} V_c^{10} + \frac{4}{3} V_T^{10} - \frac{2}{3} V_{LS}^{10} \right) (f_2^+)^2 + \left( \frac{1}{3} V_c^{10} - \frac{4}{3} V_T^{10} - \frac{2}{3} V_{LS}^{10} \right) (f_3^+)^2 + \frac{4}{3} V_{LS}^{10} f_2^+ f_3^+ \right] P_3 P^+ \\ &\quad + \left[ \left( \frac{2}{3} V_c^{10} + \frac{4}{3} V_T^{10} - \frac{2}{3} V_{LS}^{10} \right) (f_2^-)^2 + \left( \frac{1}{3} V_c^{10} - \frac{4}{3} V_T^{10} - \frac{2}{3} V_{LS}^{10} \right) (f_3^-)^2 + \frac{4}{3} V_{LS}^{10} f_2^- f_3^- \right] P_3 P^- \\ &\quad + \left[ \left( \frac{1}{6} V_c^{10} + \frac{1}{3} V_T^{10} - \frac{1}{6} V_{LS}^{10} \right) (f_2^+)^2 + \left( -\frac{1}{6} V_c^{10} + \frac{2}{3} V_T^{10} + \frac{1}{3} V_{LS}^{10} \right) (f_3^+)^2 - \frac{1}{6} V_{LS}^{10} f_2^+ f_3^+ \right] S_{12} P_3 P^+ \\ &\quad + \left[ \left( \frac{1}{6} V_c^{10} + \frac{1}{3} V_T^{10} - \frac{1}{6} V_{LS}^{10} \right) (f_2^-)^2 + \left( -\frac{1}{6} V_c^{10} + \frac{2}{3} V_T^{10} + \frac{1}{3} V_{LS}^{10} \right) (f_3^-)^2 - \frac{1}{6} V_{LS}^{10} f_2^- f_3^- \right] S_{12} P_3 P^- \\ &\quad + V_{LS}^{10} f_2^+ f_3^+ \bar{L} \bar{S} P_3 P^+ + V_{LS}^{10} f_2^- f_3^- \bar{L} \bar{S} P_3 P^- \end{aligned} \quad (5.10)$$

5.1.2. Término asociado a la energía cinética.

$$\begin{aligned} V_{\text{CIV}}^{\text{eff}\tau} &= \frac{1}{2} \left[ F_2(1,2) \left[ T(1) + T(2), F_2(1,2) \right] \right] \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ F_2(1,2) \left[ \nabla_r^2, F_2(1,2) \right] \right], \end{aligned} \quad (5.11)$$

representando  $\nabla_r$  el correspondiente operador asociado a la coordenada relativa del sistema de dos partículas,

$$\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2 \quad (5.12)$$

Aplicando los resultados

$$\begin{aligned} \left\{ Q, \vec{L} \cdot \vec{S} \right\} &= Q \cdot \vec{L} \cdot \vec{S} + \vec{L} \cdot \vec{S} Q = -\frac{1}{2} S_{12} + \vec{L} \cdot \vec{S} \\ \left[ f_i(r), \left[ \nabla_r^2, f_j(r) \right] \right] &= -2 (\nabla_r f_i(r)) (\nabla_r f_j(r)) \\ \left[ f_i(r), \left[ \nabla_r^2, Q \right] \right] &= 0 \\ \left[ Q, \left[ \vec{L}^2, Q \right] \right] &= -\frac{1}{3} S_{12} + \frac{2}{3} P_3 + 2 \vec{L} \cdot \vec{S}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

obtenemos la siguiente expresión en componentes S-T para  $V_{\text{CIV}}^{\text{eff}\tau}$  (ver apéndice B, apartados 1 y 3):

$$\begin{aligned} V_{\text{CIV}}^{\text{eff}\tau} &= \frac{\hbar^2}{3m} (\nabla_r f_1^+)^2 P_1 P^+ + \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_1^-)^2 P_1 P^- \\ &+ \frac{\hbar^2}{3m} \left[ \frac{4}{3} \frac{1}{r^2} (f_2^+)^2 + \frac{4}{3} \frac{1}{r^2} (f_3^+)^2 - \frac{8}{3} \frac{1}{r^2} f_2^+ f_3^+ + \frac{2}{3} (\nabla_r f_2^+)^2 + \frac{1}{3} (\nabla_r f_3^+)^2 \right] P_3 P^+ \\ &+ \frac{\hbar^2}{3m} \left[ \frac{4}{3} \frac{1}{r^2} (f_2^-)^2 + \frac{4}{3} \frac{1}{r^2} (f_3^-)^2 - \frac{8}{3} \frac{1}{r^2} f_2^- f_3^- + \frac{2}{3} (\nabla_r f_2^-)^2 + \frac{1}{3} (\nabla_r f_3^-)^2 \right] P_3 P^- \\ &+ \frac{\hbar^2}{3m} \left[ -\frac{1}{6} \frac{1}{r^2} (f_2^+)^2 - \frac{1}{6} \frac{1}{r^2} (f_3^+)^2 + \frac{1}{3} \frac{1}{r^2} f_2^+ f_3^+ + \frac{1}{6} (\nabla_r f_2^+)^2 - \frac{1}{6} (\nabla_r f_3^+)^2 \right] S_{12} P_3 P^+ \\ &+ \frac{\hbar^2}{3m} \left[ -\frac{1}{6} \frac{1}{r^2} (f_2^-)^2 - \frac{1}{6} \frac{1}{r^2} (f_3^-)^2 + \frac{1}{3} \frac{1}{r^2} f_2^- f_3^- + \frac{1}{6} (\nabla_r f_2^-)^2 - \frac{1}{6} (\nabla_r f_3^-)^2 \right] S_{12} P_3 P^- \\ &+ \frac{\hbar^2}{3m} \left[ \frac{1}{r^2} (f_2^+)^2 + \frac{1}{r^2} (f_3^+)^2 - 2 \frac{1}{r^2} f_2^+ f_3^+ \right] \vec{L} \cdot \vec{S} P_3 P^+ \\ &+ \frac{\hbar^2}{3m} \left[ \frac{1}{r^2} (f_2^-)^2 + \frac{1}{r^2} (f_3^-)^2 - 2 \frac{1}{r^2} f_2^- f_3^- \right] \vec{L} \cdot \vec{S} P_3 P^- \end{aligned} \quad (5.14)$$

## 5.1.3. Término asociado a la energía total.

La reunión de las dos fórmulas (5.10) y (5.14) permite expresar el potencial efectivo en forma similar a la dada para  $V(1,2)$ , mediante la definición de unas componentes efectivas  $V_i^{\text{effST}}$ ,  $i=C,T$  y LS (centra, tensor y espín-órbita), para cada canal S-T:

$$\begin{aligned}
V_{\text{CRY}}^{\text{eff}} = & \left[ V_c^{01} (f_i^+)^2 + \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_i^+)^2 \right] P_1 P^+ + \left[ V_c^{00} (f_i^-)^2 + \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_i^-)^2 \right] P_1 P^- \\
& + \left\{ \left[ \frac{2}{3} V_c^{10} + \frac{4}{3} V_r^{10} - \frac{2}{3} V_{LS}^{10} + \frac{4}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_2^+)^2 + \frac{2}{3} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_2^+)^2 + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_3^+)^2 \right. \\
& \left. + \left[ \frac{1}{3} V_c^{10} - \frac{4}{3} V_r^{10} - \frac{2}{3} V_{LS}^{10} + \frac{4}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_3^+)^2 + \left[ \frac{4}{3} V_{LS}^{10} - \frac{8}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] f_2^+ f_3^+ \right\} P_3 P^+ \\
& + \left\{ \left[ \frac{2}{3} V_c^{11} + \frac{4}{3} V_r^{11} - \frac{2}{3} V_{LS}^{11} + \frac{4}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_2^-)^2 + \frac{2}{3} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_2^-)^2 + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_3^-)^2 \right. \\
& \left. + \left[ \frac{1}{3} V_c^{11} - \frac{4}{3} V_r^{11} - \frac{2}{3} V_{LS}^{11} + \frac{4}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_3^-)^2 + \left[ \frac{4}{3} V_{LS}^{11} - \frac{8}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] f_2^- f_3^- \right\} P_3 P^- \\
& + \left\{ \left[ \frac{1}{6} V_c^{10} + \frac{1}{3} V_r^{10} - \frac{1}{6} V_{LS}^{10} - \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_2^+)^2 + \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_2^+)^2 - \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_3^+)^2 \right. \\
& \left. + \left[ -\frac{1}{6} V_c^{10} + \frac{2}{3} V_r^{10} + \frac{1}{3} V_{LS}^{10} - \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_3^+)^2 + \left[ -\frac{1}{6} V_{LS}^{10} + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] f_2^+ f_3^+ \right\} S_{12} P_3 P^+ \\
& + \left\{ \left[ \frac{1}{6} V_c^{11} + \frac{1}{3} V_r^{11} - \frac{1}{6} V_{LS}^{11} - \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_2^-)^2 + \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_2^-)^2 - \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_3^-)^2 \right. \\
& \left. + \left[ -\frac{1}{6} V_c^{11} + \frac{2}{3} V_r^{11} + \frac{1}{3} V_{LS}^{11} - \frac{1}{6} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] (f_3^-)^2 + \left[ -\frac{1}{6} V_{LS}^{11} + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] f_2^- f_3^- \right\} S_{12} P_3 P^- \\
& + \left\{ \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} (f_2^+)^2 + \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} (f_3^+)^2 + \left[ V_{LS}^{10} - 2 \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] f_2^+ f_3^+ \right\} \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^+ \\
& + \left\{ \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} (f_2^-)^2 + \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} (f_3^-)^2 + \left[ V_{LS}^{11} - 2 \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right] f_2^- f_3^- \right\} \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^-.
\end{aligned} \tag{5.15}$$

## 5.1.4. Término asociado a la norma de los estados.

Por último, expresamos en componentes por canales S-T el operador  $F_2(1,2)$ , interviniente en las fórmulas de las expansiones

en clusters. Similarmente a lo hecho en los casos anteriores, ahora tendremos (apéndice B, apartado 4):

$$F_2^2(1,2) = \left\{ \left[ f_1^+(r) P_1 + f_2^+(r) Q P_3 + f_3^+(r) Q(1-Q) P_3 \right] P^+ + \left[ f_1^-(r) P_1 + f_2^-(r) Q P_3 + f_3^-(r) Q(1-Q) P_3 \right] P^- \right\}^2 \quad (5.16)$$

que, haciendo uso de las igualdades

$$Q^2 = Q \\ (1-Q)^2 = 1 - \frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3, \quad (5.17)$$

se convierte en :

$$F_2^2(1,2) = (f_1^+(r))^2 P_1 P^+ + (f_1^-(r))^2 P_1 P^- \\ + \left[ \frac{2}{3} (f_2^+(r))^2 + \frac{1}{3} (f_3^+(r))^2 \right] P_3 P^+ + \left[ \frac{2}{3} (f_2^-(r))^2 + \frac{1}{3} (f_3^-(r))^2 \right] P_3 P^- \\ + \frac{1}{6} \left[ (f_2^+(r))^2 - (f_3^+(r))^2 \right] S_{12} P_3 P^+ + \frac{1}{6} \left[ (f_2^-(r))^2 - (f_3^-(r))^2 \right] S_{12} P_3 P^-. \quad (5.18)$$

## 5.2. Cálculo de los elementos de matriz del potencial efectivo entre los estados de dos partículas.

### 5.2.1. Componentes centrales, tensoriales y espín-órbita.

Necesitamos calcular elementos de la forma general

$$\left\langle \left( \begin{array}{c} \textcircled{0,2} \\ n_1 l_1 j_1 \end{array} \right) \middle| V_{\text{cry}}^{\text{eff}} \middle| \left( \begin{array}{c} \textcircled{0,2} \\ n_3 l_3 j_3 \end{array} \right) \right\rangle, \quad (5.19)$$

donde  $n_1$ ,  $l_1$  y  $j_1$  simbolizan, respectivamente, los números cuánticos principal, de momento orbital y de momento angular asociados a cada partícula  $i$ .

Su forma de cálculo se ha realizado basándonos fundamentalmente en la conocida propiedad de las funciones propias del potencial del oscilador armónico (1.14), para un sistema de dos cuerpos, de poder ser expresadas como producto de dos funciones dependientes exclusivamente cada una de las coordenadas relativa y centro de masas, respectivamente. Es decir, haciendo uso de la transformación de Brody-Moshinsky,

$$| \begin{array}{c} n, l_1 \quad n, l_2 \\ \triangle \\ \lambda \end{array} \rangle = \sum_{n, l, N, L} M_{\lambda}(n, l, N, L; n, l_1, n_2, l_1) | \begin{array}{c} n, l \quad N, L \\ \triangle \\ \lambda \end{array} \rangle \quad (5.20)$$

expresión que constituye la definición de los coeficientes  $M_{\lambda}$ , convenientemente tabulados (TAL52; MOS59; BRO60). En ella,  $n$  y  $l$  representan los números cuánticos principal y de momento orbital asociados a la función dependiente de la coordenada relativa, con análogo significado respecto la coordenada centro de masas para las mayúsculas. Observemos que en esta transformación se hace la elección de coordenadas

$$\begin{aligned} \bar{r} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{r}_1 - \bar{r}_2) \\ \bar{R} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\bar{r}_1 + \bar{r}_2) \end{aligned} \quad (5.21)$$

mientras que nuestro potencial efectivo viene dado en función de una coordenada relativa definida como

$$\bar{r} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \quad (5.22)$$

hecho que tendrá que ser tenido en cuenta a la hora de realizar las consiguientes integraciones.

Basta introducir las distintas componentes del potencial efectivo, anteriormente determinadas, para, haciendo uso de esta transformación y del correspondiente álgebra de Racah

(introduciendo los coeficientes 9-j), conseguir expresar el elemento de matriz buscado como función de integrales radiales de la forma

$$\int_0^{\infty} V_i^{\text{effST}}(r) R_{n'l}(r) R_{n'e}(r) r^2 dr, \quad (5.23)$$

donde  $R_{nl}(r)$  representa la parte radial de las funciones propias del oscilador armónico;  $V_i^{\text{effST}}(r)$  la correspondiente componente del potencial efectivo,  $i=C, T, LS$ , asociado a la expansión CIY y de expresión (5.2)-(5.15).

Los coeficientes con que aparecen las diversas integrales radiales serán, por supuesto, función, para un estado concreto, de cual sea el operador que acompaña a la componente (1,  $S_{12}$  o LS).

El desarrollo de todo el formalismo se encuentra pormenorizado en el apéndice C, donde se establece el requisito  $l+S+T$  impar que debe satisfacer la función antisimétrica de dos partículas en el sistema de coordenadas relativa-centro de masas (apartado C.1), y se obtienen las fórmulas asociadas con cada tipo de componentes del potencial efectivo (apartado C.2). El resultado es el siguiente:

#### 1. Componentes centrales:

$$\begin{aligned} & \left\langle \begin{array}{c} n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \text{JT} \end{array} \right| V_C^{\text{effST}} \left| \begin{array}{c} n_3 l_3 j_3 \quad n_4 l_4 j_4 \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{l_1 l_2} \delta_{j_1 j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3 n_4} \delta_{l_3 l_4} \delta_{j_3 j_4}}} \cdot \sum_{\lambda} U \begin{array}{c} l_1 \ 1/2 \ j_1 \\ l_2 \ 1/2 \ j_2 \\ \lambda \ S \ J \end{array} \cdot U \begin{array}{c} l_3 \ 1/2 \ j_3 \\ l_4 \ 1/2 \ j_4 \\ \lambda \ S \ J \end{array} \cdot \\ & \cdot M_{\lambda}(n'lNL; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_{\lambda}(n'lNL; n_3 l_3 n_4 l_4) \cdot \int_0^{\infty} R_{n'l}(r) R_{n'e}(r) V_C^{\text{effST}}(r) r^2 dr. \quad (5.24) \end{aligned}$$

## 2. Componentes tensoriales:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \begin{array}{c} n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \hline J_T \end{array} \right| V_T^{\text{eff}} S_{12} \left| \begin{array}{c} n_3 l_3 j_3 \quad n_4 l_4 j_4 \\ \hline J_T \end{array} \right\rangle \\
 &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{l_1 l_2} \delta_{j_1 j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3 n_4} \delta_{l_3 l_4} \delta_{j_3 j_4}}} \cdot 2 \cdot \sqrt{30} \cdot \sum_{\substack{\lambda \lambda' \\ n' l' e l'}} \delta_{e e', p p'} (-1)^{l + l' - J} \\
 & \times \sqrt{(2e+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} \times M_{\lambda'}(n' l' N L; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_{\lambda}(n l N L; n_3 l_3 n_4 l_4) \cdot \\
 & \times C(e l e' l'; 00) \cdot W(\lambda \lambda' 1 1; 2 J) \cdot W(e e' \lambda \lambda'; 2 L) \cdot \int_0^{\infty} R_{n' l'}(r) R_{n l}(r) V_T^{\text{eff}}(r) r^2 dr.
 \end{aligned} \tag{5.25}$$

## 3. Componentes espín-órbita:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \begin{array}{c} n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \hline J_T \end{array} \right| V_{LS}^{\text{eff}} \bar{L} \cdot \bar{S} \left| \begin{array}{c} n_3 l_3 j_3 \quad n_4 l_4 j_4 \\ \hline J_T \end{array} \right\rangle \\
 &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{l_1 l_2} \delta_{j_1 j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3 n_4} \delta_{l_3 l_4} \delta_{j_3 j_4}}} \cdot \sum_{\substack{\lambda \lambda' j \\ n' l' N L}} U \begin{array}{c} l_1 \quad 1/2 \quad j_1 \\ l_2 \quad 1/2 \quad j_2 \\ \lambda \quad 1 \quad J \end{array} \cdot U \begin{array}{c} l_3 \quad 1/2 \quad j_3 \\ l_4 \quad 1/2 \quad j_4 \\ \lambda \quad 1 \quad J \end{array} \cdot \\
 & \times (-1)^{\lambda + \lambda'} \cdot M_{\lambda'}(n' l' N L; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_{\lambda}(n l N L; n_3 l_3 n_4 l_4) \cdot \frac{1}{2} \cdot [j(j+1) - l(l+1) - 2] \cdot \\
 & \times U(L l J 1; \lambda' j) \cdot U(L l J 1; \lambda j) \cdot \int_0^{\infty} R_{n' l'}(r) R_{n l}(r) V_{LS}^{\text{eff}}(r) r^2 dr.
 \end{aligned} \tag{5.26}$$

Observemos que, debido a la diferencia ya señalada de elección de coordenada relativa  $\bar{r}$  en la transformación de Brody-Moshinsky y en la expresión del potencial, las correspondientes integrales radiales deben efectuarse tomando para el parámetro

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}}$$

del oscilador un valor

$$b_r = b\sqrt{2}$$

Las expresiones anteriores (5.24)-(5.25) son válidas también para el cálculo de los elementos de matriz a dos cuerpos del operador  $F_2(1,2)$ , dado en (5.18), sin más que realizar el oportuno cambio de funciones.

### 5.2.2. Término adicional para la FAHT.

Cuando deseemos aplicar la expansión en clusters que hemos denominado con la sigla CIY, las anteriores expresiones nos bastan para obtener sus elementos de matriz.

Si, por el contrario, queremos aplicar la expansión FAHT, lo haremos haciendo uso de la expresión (5.7), de forma que todavía necesitamos calcular para cada elemento de matriz a dos cuerpos el valor

$$\left\langle \begin{array}{c} \bigcirc \\ \begin{array}{cc} n_1 l_1 j_1 & n_1 l_1 j_1 \\ \triangle \\ J_T \end{array} \end{array} \middle| \frac{1}{2} \left[ (T(1) + T(2)) F_2^2(1,2) + F_2^2(1,2) (T(1) + T(2)) \right] \middle| \begin{array}{c} \bigcirc \\ \begin{array}{cc} n_2 l_2 j_2 & n_2 l_2 j_2 \\ \triangle \\ J_T \end{array} \end{array} \right\rangle . \quad (5.27)$$

Este elemento es calculable directamente, aplicando la

transformación de Brody-Mohinsky de nuevo. El resultado, para cada una de las componentes, es el siguiente:

1. Componentes centrales:

$$\begin{aligned}
 & \left\langle \begin{array}{c} \text{Diagram 1: Triangle with vertices } n, l, j_i \text{ and } n, l, j_i \\ \text{JT} \end{array} \middle| \frac{1}{2} \left[ (T(1)+T(2)) F_{2c}^{2ST} + F_{2c}^{2ST} (T(1)+T(2)) \right] \middle| \begin{array}{c} \text{Diagram 2: Triangle with vertices } n_3, l_3, j_3 \text{ and } n_4, l_4, j_4 \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \\
 &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3, n_4} \delta_{l_3, l_4} \delta_{j_3, j_4}}} \\
 &= \sum_{\substack{\lambda \in L \\ n n' N N'}} U \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{ccc} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & S & J \end{array} \right\} \cdot U \begin{array}{c} \left\{ \begin{array}{ccc} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & S & J \end{array} \right\} \cdot M_\lambda(n'l'N'L; n, l, n_3, l_3) \cdot M_\lambda(n'lN'L; n_4, l_4, n_4, l_4) \\
 & \times \left[ \delta_{N, N'} (n+n'+l+2N+L-1) \frac{\hbar \omega}{2} \int_0^\infty R_{n'l}(r) R_{n'l}(r) F_{2c}^{2ST} r^2 dr \right. \\
 & \quad - \delta_{N, N'} \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega}{b_r} \int_0^\infty R_{n'l}(r) R_{n'l}(r) F_{2c}^{2ST} r^4 dr \\
 & \quad \left. - \frac{1}{2} \frac{\hbar \omega}{b_{c.m.}} \langle N'L | R^2 \frac{1}{b_{c.m.}^2} | NL \rangle \cdot \int_0^\infty R_{n'l}(r) R_{n'l}(r) F_{2c}^{2ST} r^2 dr \right], \tag{5.28}
 \end{aligned}$$

donde

$$b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega}} \quad b_r = b\sqrt{2} \quad b_{c.m.} = \frac{b}{\sqrt{2}}$$

representando  $R$  el módulo de la coordenada centro de masas, y siendo

$$|N' - N| \leq 1$$

$$\langle N'L | R^2 \frac{1}{b_{c.m.}^2} | NL \rangle = \begin{cases} = 2N + L + \frac{3}{2} & \text{si } N' = N \\ = \sqrt{(N-1)(N+L+3/2)} & \text{si } N' = N-1 \end{cases} \quad , N=0,1,2,\dots$$

## 2. Componentes tensoriales:

$$\left\langle \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{JT} \end{array} \left| \frac{1}{2} \left[ (T(1)+T(2)) F_{2T}^{2ST} S_{12} + F_{2T}^{2ST} S_{12} (T(1)+T(2)) \right] \right| \begin{array}{c} \text{Diagram 2} \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{S^1} \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{e_1 e_2} \delta_{j_1 j_2}}} \times \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3 n_4} \delta_{e_3 e_4} \delta_{j_3 j_4}}} \times 2 \cdot \sqrt{30}.$$

$$\times \sum_{\substack{\lambda \lambda' j \\ n n' N N' \\ \ell \ell' L}} \delta_{\ell \ell'} \delta_{n n'} \delta_{N N'} \delta_{e e'} \delta_{j j'} \times (-1)^{\lambda + \lambda' - \ell - j + 1} \times M_{\lambda'}(n' \ell' N' L; n_1 \ell_1 n_2 \ell_2) \cdot M_{\lambda}(n \ell N L; n_3 \ell_3 n_4 \ell_4).$$

$$\times U(L \ell T J; \lambda' j) \times U(L \ell T J; \lambda j) \times U \begin{Bmatrix} \ell_1 & 1/2 & j_1 \\ \ell_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda' & 1 & J \end{Bmatrix} \times U \begin{Bmatrix} \ell_3 & 1/2 & j_3 \\ \ell_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & 1 & J \end{Bmatrix}.$$

$$\times \sqrt{2\ell+1} \times C(\ell e \ell'; 00) \cdot W(\ell e \ell'; j 2).$$

$$\times \left[ \int_{N, N'} \left( n + n' + \frac{\ell + \ell'}{2} + 2N + L - 1 \right) \text{thw} \int_0^{\infty} R_{n' \ell'}(r) R_{n \ell}(r) F_{2T}^{2ST} r^2 dr \right.$$

$$\left. - \int_{N, N'} \frac{1}{2} \text{thw} \frac{1}{b r^2} \int_0^{\infty} R_{n' \ell'}(r) R_{n \ell}(r) F_{2T}^{2ST} r^4 dr \right.$$

$$\left. - \frac{1}{2} \text{thw} \langle N' L | R_{bc.n}^2 \frac{1}{z} | N L \rangle \times \int_0^{\infty} R_{n' \ell'}(r) R_{n \ell}(r) F_{2T}^{2ST} r^2 dr \right],$$

(5.29)

con los mismos significados indicados para la expresión anterior.

**6. DETERMINACION DE LA CORRELACION.**

6.0. Introducción.

6.1. Valor esperado de un potencial a dos cuerpos en el estado fundamental.

6.2. Ecuaciones de Euler-Lagrange.

### 6.0. Introducción.

Para proceder al cálculo de las distintas energías necesitamos determinar cuál va a ser la función de correlación  $F_2(1,2)$ , dada por (1.19), que vamos a utilizar en nuestros cálculos. O sea, debemos establecer el conjunto de funciones  $f_i^+(r)$ ,  $i=1,2,3$ , que usaremos para cada núcleo

Para lograrlo vamos a efectuar un tratamiento variacional en segundo orden del estado fundamental de cada núcleo, en el marco de la CBF, suplementado con condiciones subsidiarias sobre  $F_2(1,2)$  que nos introduce en un método variacional con restricciones a bajo orden ("lowest-order-constrained-variation", LOCV; PAN71,72; OWE76,77; BIS78; KUR79; HOW78). Este tratamiento nos conducirá a la obtención de un conjunto de ecuaciones de Euler-Lagrange.

Representemos, pues, el estado fundamental de cada núcleo mediante la función de onda correlacionada normalizada

$$|\psi_0\rangle = \frac{F|\phi_0\rangle}{\langle\phi_0|F^+F|\phi_0\rangle}, \quad (6.1)$$

donde  $|\phi_0\rangle$  simboliza el correspondiente determinante de Slater construido a partir de los orbitales monoparticulares del oscilador. Queremos minimizar el valor esperado del Hamiltoniano nuclear (1.1),

$$H_{00} = \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle, \quad (6.2)$$

respecto a las componentes  $f_i^+(r)$ ,  $i=1,2,3$ , integrantes del factor de correlación para el sistema de dos cuerpos  $F_2(1,2)$ , con las restricciones adecuadas que garanticen la convergencia del desarrollo en clusters a aplicar.

Si elegimos la expansión en clusters que hemos denominado como CIY, obtendremos la expresión

$$H_{00} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A \varepsilon_i + V_{00} \quad (6.3)$$

$$V_{00} = \binom{A}{2} \langle \phi_0 | V_{\text{CIY}}^{\text{eff}} | \phi_0 \rangle, \quad (6.4)$$

donde las  $\varepsilon_i$ ,  $i=1, \dots, A$ , vienen dadas por (4.7)-(4.9), mientras que  $V_{\text{CIY}}^{\text{eff}}$  responde a las expresiones (2.30), (5.15).

Para proceder a las correspondientes variaciones, aplicando las ecuaciones de Euler-Lagrange, vamos a obtener primero las fórmulas que nos proporcionan el anterior valor esperado  $V_{00}$ , para cada núcleo concreto, en función de las componentes del potencial efectivo y la correlación. En todos los casos haremos la simplificación de considerar tan sólo contribución al valor esperado por parte de las componentes centrales, algo que tan sólo será cierto en el caso del núcleo  $A=16$ .

#### 6.1. Valor esperado de un potencial a dos cuerpos en el estado fundamental.

Definamos las densidades de estados del oscilador armónico

$$\begin{aligned} \rho_d(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= \sum_{ij} \mathcal{R}_i^2(\bar{r}_1) \mathcal{R}_j^2(\bar{r}_2) \\ \rho_{ex}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= \sum_{ij} \mathcal{R}_i^*(\bar{r}_1) \mathcal{R}_j^*(\bar{r}_2) \mathcal{R}_i(\bar{r}_2) \mathcal{R}_j(\bar{r}_1), \end{aligned} \quad (6.5)$$

donde  $\mathcal{R}$  representa la correspondiente función propia espacial del potencial del oscilador armónico. Las denominaremos respectivamente como "directa" y "de intercambio".

Si el núcleo está saturado, o sea, presenta la capa p llena

(A=16), obtenidas las expresiones de estas densidades, podremos representar el valor esperado en el estado fundamental de un potencial central general a dos cuerpos, expresado por canales S-T, según (ver apéndice D, apartado 4)

$$\langle V_c \rangle = 2\pi \int_0^\infty [(V_c^{10} + V_c^{01}) 3\rho_+(r) + (9V_c^{11} + V_c^{00})\rho_-(r)] \cdot dr, \quad (6.6)$$

expresión donde se ha realizado ya la suma sobre estados de espín e isoespín, y donde  $r$  simboliza el módulo de la coordenada relativa del sistema de dos nucleones; las densidades  $\rho_+$  y  $\rho_-$  se definen a partir de las anteriores  $\rho_d$  y  $\rho_{ex}$  según

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= r^2 [\bar{\rho}_d(r) + \bar{\rho}_{ex}(r)] \\ \rho_-(r) &= r^2 [\bar{\rho}_d(r) - \bar{\rho}_{ex}(r)] \end{aligned} \right\} \quad (6.7)$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_d(r) &= \int_V \rho_d(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} \\ \bar{\rho}_{ex}(r) &= \int_V \rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} \end{aligned} \right\} \quad (6.8)$$

$$\bar{r} = \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \quad \bar{R} = \frac{1}{2} (\bar{r}_1 + \bar{r}_2) \quad (6.9)$$

Observemos que la anterior expresión, válida de manera exacta para A=16, representa además para este núcleo el valor esperado de un potencial que, además de las centrales, poseyera componentes tensoriales y espín-órbita. En efecto, al realizar la suma sobre estados de espín e isoespín, todos los términos proporcionales a los operadores  $S_{12}$  y  $\bar{L}\bar{S}$  darían contribución nula al valor esperado. Por tanto, la anterior expresión (6.6) nos proporciona el valor esperado  $V_{00}$  sin más que sustituir cada  $V_c^{ST}$  por la

correspondiente componente central del potencial efectivo.

Las densidades  $\rho_+$  y  $\rho_-$  válidas para  $A=16$  son fácilmente construibles. Su obtención constituye el contenido del apartado 1 del apéndice D, donde se llega a las expresiones

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left(\frac{1}{2} \beta^2 r^6 - \beta r^4 + \frac{31}{2} r^2\right) \\ \rho_-(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} 4 \beta r^4 \end{aligned} \right\} A=16, \quad (6.10)$$

siendo

$$\beta = \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{b}}. \quad (6.11)$$

Si el núcleo no es de capa cerrada ( $A \neq 16$ ), diversas aproximaciones se hacen necesarias a fin de conseguir expresiones similares a las vistas hasta aquí que sean válidas en el caso de capa p abierta.

Para los valores  $A=8$  y  $A=12$  aún es posible llevar a cabo la construcción de las densidades  $\rho_d$  y  $\rho_{ex}$ , sin más que tomar en cuenta para la capa  $0p$  las funciones correspondientes a los orbitales  $0p_x$  y  $0p_x 0p_y$ , respectivamente llenos para cada uno de los dos núcleos (modelo  $SU(3)$ ).

De esta forma, podemos calcular las densidades  $\rho_+$  y  $\rho_-$ , cuyos valores han sido obtenidos en los apartados 2 y 3 del apéndice D. Las expresiones son las siguientes:

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left(\frac{1}{10} \beta^2 r^6 - \frac{1}{3} \beta r^4 + \frac{11}{2} r^2\right) \\ \rho_-(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \frac{2}{3} \beta r^4 \end{aligned} \right\} A=8 \quad (6.12)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} \cdot e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \cdot \left(\frac{4}{15} \beta^2 r^6 - \frac{2}{3} \beta r^4 + 10r^2\right) \\ \rho_-(r) &= \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} \cdot e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \cdot 2\beta r^4 \end{aligned} \right\} A=12 \quad (6.13)$$

Evidentemente, dar como válida para estos dos núcleos la expresión (6.6) para el valor esperado de un potencial a dos cuerpos en el estado fundamental, con las anteriores densidades, supone introducir además la aproximación adicional de despreciar la contribución de las componentes tensoriales y espín-órbita del potencial. Así lo haremos, a fin de tener una expresión sencilla que permita una aplicación directa de las ecuaciones variacionales de Euler-Lagrange, sin más que sustituir las anteriores componentes  $V_c^{ST}$  por las correspondientes centrales del potencial efectivo.

Nos queda pendiente, por último, el problema de generalizar la expresión (6.6) para los restantes núcleos. Para todos ellos también dejaremos de considerar la contribución de las componentes tensor y espín-órbita del potencial efectivo, y además definiremos unas densidades  $\rho_d$  y  $\rho_{ex}$  promediadas, basándonos en la fórmula del valor esperado válida para  $A=16$ .

Para este último núcleo el valor esperado de un potencial puede calcularse también, haciendo uso de la regla de suma diagonal de Slater, según la expresión

$$H_{00}^V = \sum_{\alpha l s T} (2l+1)(2s+1)(2T+1) \left\langle \begin{array}{c} \textcircled{1,2} \\ \triangle \\ \alpha l s T \end{array} \middle| V \middle| \begin{array}{c} \textcircled{1,1} \\ \triangle \\ \alpha l s T \end{array} \right\rangle, \quad (6.14)$$

donde 1, S y T representan los momentos orbital, de espín e isoespín de cada estado de dos partículas, y  $\alpha$  el conjunto de

restantes números cuánticos necesarios para identificar por completo cada elemento de matriz de dos cuerpos que contribuye a la suma. Es decir,  $\alpha$  indicará si las dos partículas correspondientes se encuentran en una de las situaciones: ambas en capa s, ambas en capa p o una en capa s y otra en capa p.

Cuando A sea distinto de 16, y la capa 0p no se encuentre completa, es posible efectuar un promedio para la contribución al valor esperado por parte de las componentes centrales del potencial a partir de la anterior fórmula, teniendo en cuenta el número de partículas  $n_p$  que la ocupan:

$$\begin{aligned}
 \langle V \rangle \cong & \sum_{\alpha l s T} (2l+1)(2s+1)(2T+1) \langle \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{S} \\ \triangle \\ \text{e s T} \end{array} | V | \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{S} \\ \triangle \\ \text{e s T} \end{array} \rangle \\
 & + \frac{n_p}{12} \sum_{\alpha l s T} (2l+1)(2s+1)(2T+1) \langle \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \text{e s T} \end{array} | V | \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \text{e s T} \end{array} \rangle \\
 & + \frac{n_p(n_p-1)}{12 \cdot 11} \sum_{\alpha l s T} (2l+1)(2s+1)(2T+1) \langle \begin{array}{c} \text{P} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \text{e s T} \end{array} | V | \begin{array}{c} \text{P} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \text{e s T} \end{array} \rangle,
 \end{aligned} \tag{6.15}$$

calculándose cada sumatoria en la suposición de que todos los elementos de matriz a dos cuerpos posibles contribuyen. Es decir, cuando  $n_p=12$  ( $A=16$ ) y las expresiones (6.6), (6.14) y (6.15) son idénticas. Basta ahora asociar a partir de (6.15) unas densidades efectivas o promediadas,  $\rho_+$  ( $r, n_p$ ) y  $\rho_-$  ( $r, n_p$ ), a cada núcleo para poder expresar el valor esperado  $H_{00}$ , de forma aproximada, como

$$H_{00} \cong \frac{1}{2} \sum_{i=1}^A \varepsilon_i + 2\pi \int_0^\infty [(V^{10} + V^{01}) 3\rho_+(r, n_p) + (9V^{11} + V^{00}) \rho_-(r, n_p)] dr. \tag{6.16}$$

Las expresiones para  $\rho_+(r, n_p)$  y  $\rho_-(r, n_p)$  se obtienen en el apartado quinto del apéndice D, donde se llega a las expresiones

$$\rho_+(r, n_p) = \frac{r^2}{96n} \left\{ R_{00}^2(r) \left[ 48 + 12n_p + \frac{12}{11} n_p(n_p-1) \right] + R_{02}^2(r) \left[ \frac{10}{11} n_p(n_p-1) \right] + R_{10}^2(r) \left[ \frac{2}{11} n_p(n_p-1) \right] \right\}$$

$$\rho_-(r, n_p) = \frac{r^2}{32n} R_{01}^2(r) \left[ 4n_p + \frac{4}{11} n_p(n_p-1) \right] \quad (6.17)$$

Como último comentario en este apartado indiquemos cuáles serán las correspondientes densidades de estados del oscilador armónico, anteriormente definidas, para el núcleo  $A=4$ , y que usaremos tan sólo en nuestro trabajo para el estudio de su estado fundamental. Su obtención, evidentemente, se lleva a cabo, sin ningún tipo de promedio, a partir de la contribución en las sumas (6.5) por parte tan sólo de los orbitales de la capa 0s del oscilador, obteniéndose:

$$\rho_d(r) = \rho_{ex}(r) = \left( \frac{\beta}{2n} \right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \quad (6.18)$$

$$\rho_+(r) = \left( \frac{\beta}{2n} \right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} 2r^2$$

$$\rho_-(r) = 0 \quad (6.19)$$

Es también evidente que para este núcleo, al igual que para  $A=16$ , la expresión (6.6) es exacta y proporciona el valor esperado tanto para un potencial central como para uno conteniendo componentes tensoriales y espín-órbita, puesto que estas últimas no darían contribución al valor esperado en el estado fundamental.

## 6.2. Ecuaciones de Euler-Lagrange.

Hemos concluido en el apartado anterior obteniendo una expresión aproximada para el valor esperado del Hamiltoniano nuclear, para cada núcleo, como un funcional general

$$H_{00} = H_{00} \left[ f_i^\pm(r), \frac{df_i^\pm}{dr}, i=1,2,3, \rho_\pm(r, n\rho), V_c^{ST}(r) \right]. \quad (6.20)$$

A continuación imponemos sobre las funciones radiales  $f_i^\pm(r)$  las condiciones

$$\left. \begin{aligned} f_i^\pm(r=c) &= 0 \\ f_i^\pm(r \gg d) &= 1 \\ \left. \frac{df_i^\pm}{dr} \right|_{r=d} &= 0 \end{aligned} \right\} i=1,2,3 \quad (6.21)$$

donde  $c$  representa la longitud del core del potencial utilizado, y  $d$  cierta distancia denominada de "healing", conjuntamente con una de las dos restricciones adicionales:

$$\begin{aligned} \text{i) Condición secuencial: } & \sum_{i,j} \langle ij | F_2^2(ij) - |ij-j\rangle \lesssim k_s \\ \text{ii) Condición de Pauli: } & \sum_{i,j} \langle ij | F_2(ij) - |ij-j\rangle \lesssim k_p. \end{aligned} \quad (6.22)$$

Puntualicemos que estas restricciones se imponen de forma alternativa. Es decir, no podemos imponer las dos conjuntamente. El significado de cada una de ellas, para un valor cero del correspondiente parámetro  $k_i$ ,  $i=s$  o  $p$ , respectivamente, es el siguiente:

i) Condición secuencial: asegurar un volumen de correlación aproximadamente nulo.

ii) Condición de Pauli: asegurar que la excitación de dos partículas sea aproximadamente ortogonal, en promedio, al estado fundamental.

Nuestro propósito es realizar un cálculo variacional, con las anteriores restricciones. Por tanto, tendremos que obtener el correspondiente conjunto de ecuaciones de Euler-Lagrange asociadas a nuestro problema.

Las condiciones mencionadas (secuencial o de Pauli) se imponen

a fin de establecer la convergencia de la expansión en clusters necesaria para que el cálculo en segundo orden (LO) tenga sentido. Es decir, controlarán la convergencia del desarrollo aplicado. Ambas han sido ampliamente estudiadas y aplicadas frecuentemente en diversos trabajos (CLA79,72,79a,81; MUE70; RIS71; GUA79,80).

En el apéndice E se encuentra desarrollado detalladamente el proceso de deducción de las mencionadas ecuaciones variacionales correspondientes al problema planteado. El resultado allí obtenido, tras introducir unas nuevas funciones incógnitas

$$\bar{f}_i^\pm(r) = \rho_\pm^{1/2}(r) f_i^\pm(r) \quad (6.24)$$

a fin de obtener ecuaciones en las que no figure explícitamente la derivada primera, se resume en el siguiente conjunto de ecuaciones diferenciales:

$$\frac{d^2 \bar{f}_1^k}{dr^2} + \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_k} \frac{d^2 \rho_k}{dr^2} + \frac{1}{4} \frac{1}{\rho_k^2} \left( \frac{d\rho_k}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{0T_k} + \lambda_1^k) \right] \bar{f}_1^k(r) = 0$$

$$(k, 0T_k) \equiv (+, 01), (-, 00)$$

$$\frac{d^2 \bar{f}_2^k}{dr^2} + \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_k} \frac{d^2 \rho_k}{dr^2} + \frac{1}{4} \frac{1}{\rho_k^2} \left( \frac{d\rho_k}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{1T_k} + 2V_r^{1T_k} - V_{L3}^{1T_k} + 2\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_2^k) \right] \bar{f}_2^k(r) = \left( \frac{m}{\hbar^2} V_{L3}^{1T_k} - \frac{2}{r^2} \right) \bar{f}_2^k(r)$$

$$\frac{d^2 \bar{f}_3^k}{dr^2} + \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_k} \frac{d^2 \rho_k}{dr^2} + \frac{1}{4} \frac{1}{\rho_k^2} \left( \frac{d\rho_k}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{1T_k} - 4V_r^{1T_k} - 2V_{L3}^{1T_k} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_3^k) \right] \bar{f}_3^k(r) = \left( \frac{m}{\hbar^2} V_{L3}^{1T_k} - \frac{2}{r^2} \right) 2\bar{f}_2^k(r)$$

$$(k, 1T_k) \equiv (+, 10), (-, 11) \quad , \quad (6.25)$$

simbolizando  $\lambda_i^k$  ( $k=+, -; i=1, 2, 3$ ), los correspondientes multiplicadores de Lagrange, y donde las nuevas funciones  $\bar{f}_i^\pm(r)$  deben satisfacer ahora las condiciones

$$\bar{f}_i^\pm(r=c) = 0$$

$$\bar{f}_i^\pm(r \gg d) = \rho_\pm^{1/2}(r)$$

$$\left. \frac{d\bar{f}_i^\pm}{dr} \right|_{r=d} = \frac{1}{2} \rho_\pm^{-1/2}(r) \left. \frac{d\rho_\pm}{dr} \right|_{r=d} ,$$

(6.26)

obtenidas a partir de (6.21) aplicando (6.24).

Obtenemos, por tanto, una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden para cada función  $\bar{f}_i^\pm(r)$ , asociadas a los canales singlete de espín, y un sistema de dos ecuaciones de segundo orden acopladas para el par de funciones  $\bar{f}_2^\pm(r)$ ,  $\bar{f}_3^\pm(r)$ , asociadas con cada canal triplete de espín; todas las ecuaciones carecen de términos en la derivada primera de las funciones.

La resolución de este conjunto de ecuaciones ha sido llevada a cabo numéricamente. El procedimiento de cálculo seguido es descrito a continuación brevemente.

En esencia, resolvemos para un valor de prueba del parámetro  $\lambda$  una ecuación del tipo general

$$y'' + g_1(r)y + \lambda y = g_2(r) , \quad (6.27)$$

donde  $g_1$  y  $g_2$  son funciones perfectamente definidas. Esta ecuación es equivalente al siguiente sistema de ecuaciones, obtenido dividiendo el intervalo entre los valores  $r=c$  y  $r=d$  en  $n$  segmentos de longitud igual a cierto paso  $h$ :

$$(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) + h^2 g_{1n} y_n + \lambda h^2 y_n = g_{2n} h^2 , \quad n=1,2,\dots,N-1,$$

donde

(6.28)

$$\begin{aligned}
 y_i &\equiv y(r = c + ih) \\
 y_0 &= 0 \\
 y_N &= \rho^{1/2}(d)
 \end{aligned}
 \tag{6.29}$$

Resuelto el sistema en las  $N-1$  incógnitas  $\{y_n\}_{n=1}^{N-1}$ , el valor

$$y_{N+1} = y(r = d + h) \tag{6.30}$$

es calculado mediante la expresión

$$y_{N+1} - 2y_N + y_{N-1} + h^2 g_{1N} y_N + h^2 \lambda y_N = g_{2N} h^2 \tag{6.31}$$

y, a partir de él, conocemos el valor correspondiente

$$y'_N = y'(r = d) = \frac{y_{N+1} - y_{N-1}}{2h}, \tag{6.32}$$

asociado con el valor de  $\lambda$  utilizado. Este valor  $y'_N$  está fijado en las condiciones (6.26), de manera que si éstas se satisfacen  $\lambda$  es el valor correcto. En caso contrario, realizamos una interpolación a partir de dos puntos iniciales  $(\lambda_1, y'_{N_1})$ ,  $(\lambda_2, y'_{N_2})$ , aplicando la "regula falsi" (PHI73) y procediendo iterativamente hasta que el error en la determinación de  $\lambda$  sea despreciable.

Este proceso se aplica directamente en la resolución de las ecuaciones (6.25), con las siguientes puntualizaciones:

i) Para los canales singlete, donde tenemos una sola ecuación,  $g_2 \equiv 0$ .

ii) Para los canales triplete, donde se tiene establecido un sistema de dos ecuaciones acopladas, ambas son resueltas de manera sucesiva, suponiendo una función arbitraria  $g_2$  inicial de prueba para la primera (cualquiera de ellas) que permite obtener una primera estimación de su solución; a partir de ésta el proceso continúa de manera iterativa calculando el segundo miembro de cada ecuación a partir de la solución obtenida para la compañera en la etapa inmediatamente anterior.

Respecto a la imposición de la condición subsidiaria elegida,

(6.22) o (6.23), otra "regula falsi" es aplicada en el espacio  $(k_i, d)$ , siendo  $k_i$  el valor de la constante que figura en la correspondiente condición y  $d$  el valor de la distancia de healing. Por tanto, fijado un  $k_i$  obtenemos la distancia  $d$  y el conjunto de funciones  $f_i^\pm(r)$ ,  $i=1,2,3$ , asociadas que satisfacen todas las condiciones impuestas.

Es evidente que en cada uno de estos cálculos el valor  $\hbar\omega$  del parámetro del oscilador está fijado de antemano. Por tanto, para cada valor  $\hbar\omega$  obtenemos un conjunto de funciones  $f_i^\pm(r)$ ,  $i=1,2,3$ , tales que cumplen todas las condiciones impuestas, para ciertos valores del parámetro  $k_i$  y la distancia de healing  $d$ . Señalemos que, fijados dos de estos tres valores ( $\hbar\omega$ ,  $k_i$  y  $d$ ), el restante queda completamente determinado, de manera que sólo dos de ellos pueden ser considerados como parámetros variacionales independientes.

Por lo que respecta a  $k_i$ , buscaremos el valor mínimo que nos proporcione una ligadura adecuada para el estado fundamental de cada núcleo. Recordemos que  $k_i$  controla la convergencia de la expansión en clusters, de manera que, aunque perdamos energía de ligadura, no podemos tomarlo demasiado elevado.

Las figuras (2)-(4) muestran las funciones radiales  $f_i^\pm(r)$ ,  $i=1,2,3$ , obtenidas para los núcleos de número másico  $A=9,12$  y  $16$ , con los valores  $\hbar\omega=15\text{MeV}$  y  $k_p=0.4$ . Los correspondientes valores para la distancia de healing  $d$  asociados son, respectivamente,  $2.585$ ,  $2.470$  y  $2.416$  fermis. Su aspecto para otros núcleos y valores próximos de los parámetros es totalmente similar.

En estas figuras observamos como tres de las funciones componentes de la correlación ( $f_1^+$ ,  $f_2^+$  y  $f_3^-$ ) presentan valores por encima de la unidad ("overshooting") para ciertos valores de la

coordenada  $r$ , tanto más acusadamente cuanto menor es  $A$ . Esta circunstancia se hace necesaria para un cumplimiento estricto de las condiciones subsidiarias (6.22) o (6.23).

Representando las componentes del potencial efectivo asociado con cada una de estas funciones de correlación se obtienen las gráficas de las figuras (5)-(7). En ellas se aprecia claramente como la correlación introducida trata el core del potencial utilizado (Reid V-8), representado por su parte en la figura 1.

**7. RESULTADOS.**

**7.0. Introducción.**

**7.1. Estados fundamentales.**

**7.2. Estados excitados.**

### 7.0. Introducción.

A continuación se presentan los resultados obtenidos aplicando todo lo expuesto anteriormente al estudio de los núcleos en capa 0p. Abarcan tanto los valores correspondientes a los estados fundamentales como los espectros de excitaciones obtenidos para cierta elección del conjunto de todos los parámetros que se manejan y de los cuales dependen las energías tal como se calculan: parámetro del oscilador  $\hbar\omega$ , parámetro  $k_1$  en la condición subsidiaria elegida ( $i=s$ , condición secuencial, o  $i=p$ , condición de Pauli), distancia de healing  $d$ , número másico  $A$ . Recordemos que, según quedó indicado en el apartado 6.2, de los tres parámetros mencionados,  $\hbar\omega$ ,  $k_1$  y  $d$ , sólo dos son independientes y que, fijados los valores de todos los parámetros, queda determinado el conjunto de funciones radiales  $\left\{ f_1^{\pm}(r) \right\}_{i=1}^3$ , componentes de la correlación utilizada.

Los resultados, salvo en lo que refiere a la figura 8a, no se presentan corregidos en centro de masas. Para los estados fundamentales, debido a la elección hecha de orbitales monoparticulares como los del oscilador armónico, la corrección puede hacerse restando el valor  $3\hbar\omega/4$  asociado a un orbital 0s del oscilador.

Para los estados excitados la no corrección se reflejará en la "contaminación" de los niveles, ya que el Hamiltoniano que hemos utilizado no es invariante traslacionalmente y, por tanto, sufrirán una mezcla con estados espúreos asociados al centro de masas. Aparecerán, además, niveles espúreos, con un gran porcentaje de tal contaminación y que debieran ser ignorados en la comparación con los datos experimentales, pero que no son fácilmente identificables en general.

Señalemos, por último, que nuestros resultados no incluyen el cálculo de la energía de Coulomb correspondiente a cada núcleo.

### 7.1. Estados fundamentales.

La aplicación de lo expuesto hasta aquí en esta memoria nos proporciona, en primer lugar, los resultados que constituyen las figuras 9-15. En ellas se muestran los valores obtenidos para la energía del estado fundamental a partir de la expresión (6.16), para cada núcleo, como función del parámetro del oscilador  $\hbar\omega$  (expresado en MeV) y el valor  $k_1$  de la condición subsidiaria elegida en cada caso.

Es conveniente hacer las siguientes puntualizaciones sobre estas figuras:

1) El desarrollo en clusters aplicado en su obtención es el que hemos denominado CIY, de expresión dada por las fórmulas (2.28)-(2.30) al segundo orden en que lo hemos cortado.

2) En su obtención sólo se han tenido en cuenta las componentes centrales del potencial efectivo correspondiente, ignorando las tensoriales y espín-órbita. Estas últimas dan contribución no nula para cualquier núcleo excepto aquéllos con capas cerradas.

3) No incorporan mezcla de configuraciones, estando calculadas haciendo uso de unas densidades de estados del oscilador armónico definidas por las expresiones (6.5) y calculadas de forma aproximada en general.

4) La correlación usada en cada punto corresponde a la obtenida resolviendo un conjunto de ecuaciones variacionales de Euler-Lagrange, de expresión dada por (E.22)-(E.25) (ver apéndice E).

Por otra parte, si observamos las curvas mostradas en las distintas figuras, podemos realizar los siguientes comentarios:

1) Para un mismo valor del parámetro  $k_1$ , la condición de Pauli ( $i=p$ ) proporciona mayores valores de ligadura que la secuencial ( $i=s$ ).

2) Para ambas condiciones, un mayor valor de  $k_1$  permite la obtención de mayores valores de ligadura.

3) Los mínimos variacionales obtenidos corresponden a valores excesivamente altos del parámetro  $\hbar\omega$  del oscilador. Esta circunstancia se agudiza conforme  $A$  aumenta y, fijado  $A$ , es más acusada si la condición impuesta es la de Pauli que si trabajamos con la condición secuencial.

Valores altos de  $\hbar\omega$  se asocian con densidades nucleares demasiado compactas o, en otras palabras, tamaños nucleares más pequeños. Esta situación acarreará un incremento de las energías de ligadura, y es de esperar, como efectivamente ocurre, que se refleje también en los espectros, llevándonos a obtener energías de excitación muy elevadas asociadas con esos puntos.

Señalemos aquí que los resultados de Bishop et al. (BIS78) coinciden con los nuestros en esta característica. Estos autores realizan un estudio de los núcleos  ${}^4\text{He}$ ,  ${}^{12}\text{C}$  y  ${}^{16}\text{O}$ , en el marco LOCV, imponiendo como restricción la condición secuencial para valores  $k_s$  entre 0.15 y 0.4, y empleando una correlación similar a la nuestra; el potencial utilizado es el de Reid soft-core completo (REI68). Sus resultados también proporcionan mínimos de ligadura para valores  $\hbar\omega$  demasiado elevados. Así, los mínimos obtenidos para los tres núcleos mencionados,  $A=4$ , 12 y 16, se sitúan para valores  $\hbar\omega$  respectivos alrededor de 32, 23 y 22 MeV, para  $k_s=0.4$ . Al igual que en nuestro caso, disminuir  $k_s$  lleva a

disminuir en los tres núcleos el valor  $\hbar\omega$  para el que se alcanza el mínimo variacional. Los correspondientes valores de ligadura son muy superiores a los nuestros, por encima de los experimentales en los tres núcleos: sobre 55, 100 y 225 Mev respectivamente para los tres núcleos mencionados.

Irvine et al. (IRV76) han llevado a cabo también cálculos de los estados fundamentales de los núcleos con número másico comprendido entre 4 y 12, aplicando el potencial de Reid soft-core completo. Parametrizan las componentes de la función de correlación tomándolas como gaussianas, e introducen componentes tensoriales en los canales  ${}^3S_1$ - ${}^3D_1$ . La energía de ligadura es minimizada respecto a los parámetros correspondientes, controlando el cumplimiento de la condición secuencial. Sus resultados presentan la misma característica: los mínimos se alcanzan para valores de  $\hbar\omega$  alrededor de 20 MeV.

Una vez determinada la correlación  $F_2(1,2)$  a emplear en cada punto de coordenadas  $(\hbar\omega, k_1)$  para cada núcleo, el paso siguiente es obtener los correspondientes espectros de niveles excitados. Para ello vamos a proceder previamente a recalcular el estado fundamental de cada núcleo, a fin de incorporar tanto las contribuciones de las componentes tensor y espín-órbita del potencial efectivo como, en su caso, las provenientes de la mezcla de configuraciones. Al mismo tiempo, calcularemos también los valores de energía obtenidos con las mismas funciones de correlación pero aplicando el desarrollo FAHT.

Por razones que serán expuestas en la discusión de los estados excitados, la elección hecha de parámetro  $\hbar\omega$  y condición subsidiaria ha sido la siguiente:

$$-\hbar\omega=15 \text{ MeV.}$$

-Condición de Pauli con  $k_p = 0.4$ .

Los valores de los multiplicadores de Lagrange asociados con este punto se indican para cada núcleo en la tabla 1, donde también figura en la última columna la correspondiente distancia de healing expresada en fermis.

Los valores de estos multiplicadores son, como puede observarse, muy similares para todos los núcleos, aumentando ligeramente en todos los casos con el número másico, conservando el signo. Respecto a la distancia de healing  $d$ , toma valores entre 2.4 fm. y 3 fm. para todos los núcleos, aumentando su valor al disminuir  $A$ .

La obtención del estado fundamental puede hacerse considerando únicamente funciones  $0p-0h$  o considerando conjuntamente funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$  de las descritas en el apartado 3 de esta memoria, excluyéndose las funciones  $1p-1h$  por razones evidentes de conservación de paridad.

En el primer caso (sólo funciones  $0p-0h$ ) los núcleos  $A=4$  y  $A=16$  quedan excluidos de la tarea de recalcular sus estados fundamentales, como ya se ha dicho, debido a que, al presentar todas sus capas cerradas, sólo una función es posible y, además, las componentes tensor y espín-órbita del potencial efectivo darán contribución nula. Cosas ambas que dejarán de ocurrir si consideramos el espacio integrado conjuntamente por funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$ .

Las tablas 2 y 3 muestran respectivamente los resultados obtenidos para los estados fundamentales de cada núcleo con cada uno de los desarrollos en clusters aplicados. En estas tablas las sucesivas columnas contienen:

-Número másico  $A$ .

-Valores de momento angular, paridad y momento de isoespín,  $J^{\pi}; T$ , asociados con los estados fundamentales experimentales.

-Idem para los asociados en nuestro cálculo, para los dos casos de considerar i) funciones  $0p-0h$  exclusivamente e ii) funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$  (si coinciden se indica una sola vez).

-Valores de energía obtenidos mediante la expresión (6.16), usando las densidades de estados del oscilador correspondientes (esta columna no aparece en la tabla 3 que atañe a la FAHT).

-Valores de energía obtenidos considerando exclusivamente funciones  $0p-0h$ .

-Idem considerando conjuntamente funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$ .

En ambas tablas, los números entre paréntesis en las dos últimas columnas indican los valores de energía asociados con los valores  $J^{\pi}; T$  experimentales cuando éstos no coinciden con los teóricos.

En la tabla 3 se incluyen también dos columnas conteniendo las dimensiones de los subespacios en que se ha resuelto el problema de valores propios generalizado (1.25) correspondiente. Es evidente que estas dos columnas son también aplicables a la anterior tabla 2, donde no diguran por razones de espacio.

Estas dimensiones se corresponden, construidas las funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$  según lo expuesto en el apartado 3, con la consideración de todas las funciones posibles en el caso  $0p-0h$ . Por el contrario, el espacio integrado por funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$  conjuntamente ha sido truncado, para algunos núcleos, introduciendo la restricción adicional de mantener siempre un número mínimo  $n_p$  de partículas en la capa  $0p_{3/2}$ . Concretamente, esto ha sido efectuado para los núcleos con número másico entre 9 y 15, ambos inclusive.

La razón de este proceder es conseguir que la dimensión de la base considerada en cada subespacio de momento angular  $J$  y de isoespín  $T$ , paridad  $\pi$  dada  $\cdot P$ , no exceda de cierto número, fijado por nosotros en 180 e impuesto por razones debidas a nuestras posibilidades materiales de cálculo.

Es de suponer que, como consecuencia de esta restricción adicional, se produzca una pérdida de energía de ligadura, puesto que disminuimos la dimensión del espacio variacional. No obstante, esperamos que esta pérdida se refleje de modo semejante en los valores de los estados excitados, de forma que sus valores relativos sufran en menor medida sus efectos.

Un estudio de las repercusiones de esta truncación ha sido llevado a cabo, dentro de nuestras posibilidades de cálculo. La tabla 4 muestra los resultados de tal exploración, dándose en ella los valores correspondientes al estado fundamental y a algunos excitados como función del mencionado número  $n_p$ . Se incluyen también resultados para los núcleos  $A=8$  y  $A=16$ , en los que el cálculo con el valor de  $n_p$  sin restringir, o libre, es posible.

La observación de la tabla permite comprobar que el efecto de aumentar  $n_p$  conlleva efectivamente una pérdida de energía de ligadura. Este efecto se agudiza al aumentar el número másico, teniéndose, por ejemplo, un incremento de energía de 0.155 MeV para  $A=8$  y de 0.523 MeV para  $A=16$ , por partícula y con el desarrollo CIY, estado fundamental (0.121 MeV y 0.840 MeV respectivamente con la FAHT), entre los dos valores extremos de  $n_p$  posibles para estos núcleos.

Respecto a los estados excitados, algunos de los cuales figuran en la tabla, el efecto parece ir en general parejo al del estado fundamental. De esta forma, como dijimos, los valores

relativos de las excitaciones sufrirán en menor medida los efectos de esta restricción, aun haciéndolo.

La figura 8a muestra el comportamiento de la energía de ligadura por partícula en el estado fundamental como función del número másico. Los valores correspondientes aparecen en la tabla 5, hallándose corregidos en centros de masas; los valores experimentales están extraídos de (IRV72).

En la figura correspondiente al desarrollo CIY aparecen, junto a la curva experimental, las dos curvas obtenidas i) a partir de la expresión (6.16), es decir, usando las densidades de estados del oscilador dadas por (6.5) y considerando tan sólo las componentes centrales del potencial efectivo, e ii) considerando el espacio de funciones  $0p-0h$ , incorporando mezcla de configuraciones y componentes tensoriales y espín-órbita del potencial efectivo. Esta segunda curva es la que aparece en la gráfica asociada con el desarrollo FAHT, junto a la experimental.

Sobre esta figura es interesante destacar el buen comportamiento cualitativo de la energía de ligadura por partícula frente a la experimental, con una adecuada reproducción de los máximos de los núcleos  $A=4,8,12$  y  $16$ .

Por su parte, la tabla 6 nos muestra, para los dos desarrollos en clusters, el efecto sobre el estado fundamental causado por la inclusión de funciones  $2p-2h$  en el cálculo. Sus datos permiten dibujar la figura 8b, donde aparece representado el incremento de energía de ligadura por partícula provocado.

Sobre esta figura 8b conviene recordar que los núcleos comprendidos entre los valores del número másico  $A=9$  y  $A=14$ , ambos incluidos, están calculados con un valor  $n_p$  (indicativo del número de partículas obligadas a permanecer en la capa  $0p_{3/2}$  para todas

las funciones) inferior al libre. Destacan a su vista dos características:

1) Presencia de máximos para las contribuciones en los núcleos  $A=6,8,12$  y  $16$ .

2) Contribución muy baja para los núcleos  $A=9,10,11$  y  $13$ . Esta segunda característica es fácilmente atribuible al hecho de que son estos cuatro núcleos aquéllos en que nos hemos quedado a mayor distancia del valor  $n_p$  libre, según queda indicado en la parte inferior de la mencionada tabla 6.

Finalmente, y para concluir este apartado, podemos resumir los resultados presentados con los siguientes comentarios principales:

1) El desarrollo FAHT proporciona, en todos los casos, menores valores absolutos de ligadura. Esto puede tener su explicación si se considera que las ecuaciones variacionales usadas para determinar el factor de correlación  $F_2(1,2)$  están basadas en el desarrollo CIY, de manera que parece lógico esperar que sus soluciones corresponderán más acertadamente a la región de los mínimos para este último.

2) Con pocas excepciones ( $A=7,10$  y  $11$ ) reproducimos correctamente los valores de momento angular  $J$  y de isoespín  $T$  asociados con el estado fundamental experimentalmente. En los casos en que no ocurre así, los valores de energía para los estados asociados con los valores  $J;T$  del estado fundamental experimental se encuentran muy próximos a nuestros estados fundamentales.

3) Buen comportamiento cualitativo de la energía de ligadura por partícula como función del número másico  $A$ , reproduciéndose los máximos experimentales de los núcleos  $A=4,8,12$  y  $16$ .

## 7.2. Estados excitados.

Presentamos a continuación los resultados obtenidos para los estados excitados de los núcleos en capa p,  $5 \leq A \leq 16$ . Previamente realizaremos una discusión sobre el criterio seguido para fijar el conjunto de valores de los parámetros  $\hbar\omega$  y  $k_i$ ,  $i=s,p$ , que nos determinarán la correlación a usar para cada núcleo.

Para realizar esta elección hemos procedido a realizar una comparación entre los resultados obtenidos para el espectro de excitación del  $^{16}_0$  con diversas elecciones de los parámetros. Concretamente, hemos estudiado los siguientes conjuntos:

- 1)  $\hbar\omega=15$  MeV, condición secuencial con  $k_s=0$  ( $d=2.178$  fm.).
- 2)  $\hbar\omega=15$  MeV, condición de Pauli con  $k_p=0$  ( $d=2.280$  fm.).
- 3)  $\hbar\omega=15$  MeV, condición de Pauli con  $k_p=0.4$  ( $d=2.416$  fm.).
- 4)  $\hbar\omega=25$  MeV, condición secuencial con  $k_s=0$  ( $d=2.328$  fm.).
- 5)  $\hbar\omega=30$  MeV, condición de Pauli con  $k_p=0$  ( $d=2.550$  fm.).

Señalemos que los dos últimos conjuntos de valores, 4) y 5), corresponden, respectivamente, a los mínimos de energía obtenidos para el estado fundamental al imponer una u otra condición.

Los diversos espectros de excitación así obtenidos constituyen las figuras 16-25, donde se hallan representados los niveles por sus valores relativos al estado fundamental. Los niveles obtenidos con funciones  $0p-0h$  (paridad igual a la del estado fundamental) y funciones  $1p-1h$  (paridad contraria), se han representado respecto al correspondiente estado fundamental  $0p-0h$  tomado como origen de energías. Los niveles obtenidos en espacios integrados conjuntamente por funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$  (paridad igual que la del estado fundamental) se hallan representados respecto al correspondiente estado fundamental  $0p0h-2p2h$ . Los datos experimentales están sacados de (AJZ77). Respecto a la notación

utilizada, señalemos que un punto a la izquierda o derecha de un nivel experimental indica, respectivamente, un valor de isoespín T o momento angular J y paridad P, no bien establecidos; en aquellas gráficas que aparecen en figuras donde no se ha especificado el isoespín T, éste se halla claramente establecido cuando está indicado a la izquierda del nivel.

La observación de las mencionadas figuras permite hacer las siguientes afirmaciones:

1) Como preveíamos, valores altos de  $\hbar\omega$  ( $\hbar\omega \geq 20$  MeV) se traducen en elevadas energías de excitación.

2) El efecto de elegir una condición subsidiaria u otra, fijados los valores de  $\hbar\omega$  y  $k_1$ , se refleja en los valores relativos y ordenación de las excitaciones en mucha menor medida de lo que lo hace en sus valores absolutos.

3) Los dos fenómenos anteriores se producen muy similarmente para ambos desarrollos en clusters. No obstante, hay que señalar que la FAHT acusa en menor medida que la CIY, aun haciéndolo, el incremento de las energías de excitación mencionado en 1.

4) Aumentar  $\hbar\omega$  incrementa las energías de excitación, separando los niveles, pero conserva esencialmente su ordenación, de forma que los espectros obtenidos para los cinco conjuntos anteriormente especificados son i) cualitativamente muy semejantes, e ii) cuantitativamente muy diferentes.

Todas estas consideraciones nos han llevado a elegir el siguiente conjunto de valores de los parámetros en el cálculo de los espectros de excitaciones de los restantes núcleos:

- $\hbar\omega=15$  MeV.

-Condición de Pauli con  $k_p=0.4$ .

Con esta elección pretendemos asegurar, de una parte, valores suficientes de ligadura para los estados fundamentales y, de otra, energías de excitación sensatas o, dicho de otra manera, no tan altas como las mostradas en las figuras anteriores para los valores  $\hbar\omega=25$  MeV y  $\hbar\omega=30$  MeV.

Puntualicemos que no se pretende afirmar que esta elección sea la óptima, como no se podría hacer para ninguna otra. Es claro que esta elección es problemática, y en concreto contra ella se podría argumentar que no corresponde a ningún mínimo en las figuras 10-15, en general, y que sigue proporcionando elevados valores de energías de excitación en comparación con los experimentales.

Sin embargo, y puesto que estamos interesados principalmente en la distribución cualitativa de niveles, más que en sus valores absolutos de energía, damos por válida la elección mencionada, considerando sobre todo que, según hemos visto para el  $^{16}\text{O}$ , esta distribución cualitativa es muy similar para distintas elecciones de los valores de los parámetros.

En lo que respecta al valor del parámetro restante  $n_p$  anteriormente introducido, el tener que considerar dimensiones inferiores a 180 en todo el espectro nos ha obligado a tomar los siguientes valores:

$$-A=9: n_p = 3.$$

$$-A=10: n_p = 4.$$

$$-A=11: n_p = 5.$$

$$-A=12: n_p = 6.$$

$$-A=13,14,15: n_p = 7.$$

Como ya indicamos, esperamos que esta truncación, que necesariamente se ha de reflejar en los valores absolutos de las energías, lo haga en menor medida en sus valores relativos.

Las figuras 24-52 muestran los espectros obtenidos, con la anterior elección para los valores de los distintos parámetros, para cada uno de los núcleos bajo consideración,  $5 \leq A \leq 16$ . La notación en estas figuras es la misma que en las anteriores; los correspondientes datos experimentales están extraídos de las referencias (AJZ75-79).

Los comentarios posibles a realizar sobre estas figuras creemos que se encuentran implícitos en su presentación y observación. Nos limitaremos tan sólo, por tanto, a destacar las características más llamativas, dejando a las figuras exhibir sus contenidos por sí mismas.

Los principales comentarios que podemos realizar sobre las diversas figuras presentadas son:

- 1) Reproducción más adecuada de los primeros estados excitados, especialmente para los núcleos más ligeros.
- 2) Los espectros son cualitativamente aceptables; cuantitativamente los valores obtenidos están lejos de los experimentales.
- 3) Los niveles obtenidos en los espacios integrados conjuntamente por funciones  $0p-0h$  y  $2p-2h$  se caracterizan por:
  - 3.1) Pequeñas modificaciones respecto a los análogos obtenidos con funciones exclusivamente  $0p-0h$ , con un desplazamiento hacia arriba que se incrementa con el número másico.
  - 3.2.) Altos valores de excitación para los estados propios  $2p-2h$ , especialmente para los núcleos de mayor número másico.
- 4) Los dos desarrollos en clusters usados llevan a resultados muy similares, destacando el hecho de que la FAHT proporciona en general energías de excitación relativas algo

menores que la CIY.

5) La comparación de nuestros resultados con los experimentales evidencia la presencia de niveles para los cuales no es posible la identificación con ninguno experimental. Es el caso, por ejemplo, del primer nivel  $1^-;0$  en la figura 25, correspondiente al espectro de paridad impar (excitación  $1\hbar\omega$ ) del  $^{16}\text{O}$ .

La explicación de este último fenómeno es clara: recordemos que el Hamiltoniano usado en nuestros cálculos, el cual define la base de estados no correlacionados  $|\phi_m\rangle$ , no es invariante traslacionalmente. Por tanto, nos aparecerán excitaciones asociadas al centro de masas que deben ser ignoradas en la comparación con los datos experimentales. Además, el hecho de incluir sus funciones propias en la diagonalización acarreará errores en la localización de los estados intrínsecos de igual momento angular, paridad e isoespín.

Volviendo al ejemplo mencionado del  $^{16}\text{O}$ , la consecuencia es que los estados  $1^-;0$  sufrirán los efectos de la inclusión en la diagonalización del único estado espúreo posible  $1^-;0$  (núcleo con capas cerradas), identificable fácilmente con el primer nivel que aparece en la figura (LAW80).

Otro ejemplo sencillo de desarrollar es el caso de  $A=15$ . Los estados  $0p-0h$  posibles, caracterizados por los números cuánticos  $1/2^-;1/2$  (estado fundamental) y  $3/2^-;1/2$ , darán lugar a los estados espúreos (GIR65)  $1/2^-;1/2$  (dos),  $3/2^-;1/2$  (dos) y  $5/2^-;1/2$ , al excitar con un cuanto ( $1\hbar\omega$ ); los estados  $1/2^-;1/2$  tendrían también contribución de las funciones correspondientes a la excitación de una partícula desde la capa  $0s$  a la  $0p$ , no incluidas por nosotros. Todos estos estados estarían degenerados, característica que perdemos principalmente por el hecho de cortar el desarrollo en

clusters en segundo orden. Si acudimos a la figura 27, concluiremos que los primeros niveles que aparecen en el correspondiente espectro ( $T=1/2$ ) serán identificables con estos niveles espúreos.

Es posible proceder a la construcción de todos los estados espúreos posibles para cada núcleo, obteniendo además sus energías asociadas. Esto permitiría su identificación completa, así como de los estados intrínsecos contaminados por su inclusión en el espacio de configuraciones. Ello conllevaría la obtención de las funciones propias asociadas, lo cual supone una laboriosa tarea. No lo haremos, presentando en cada figura todos los primeros niveles excitados obtenidos en cada caso, siendo conscientes de que parte de ellos sufrirán todos estos efectos.

Por último, procedemos a hacer un comentario particularizado para algunos de los núcleos estudiados.

-A=16 (figuras 24 y 25):

Descartado el primer nivel  $1^-;0$ , señalado como espúreo, nuestros resultados presentan cierta similitud con los experimentales, especialmente si nos reducimos a considerar sólo los primeros niveles presentados. Destaquemos la inversión de posiciones entre los niveles caracterizados por los momentos angulares 0 y 2.

Si comparamos tanto con los resultados obtenidos por Clark et al. (CLA79b; MEA80) para el espectro de paridad impar del  $^{16}\text{O}$ , calculados con los potenciales OMY (OHM56) y KK (KAL64) usando correlaciones centrales en forma de gaussianas e imponiendo la condición de Pauli, como con los de Kallio y Kolltweit con la teoría de Brueckner y dicho potencial KK (KAL64), la conclusión es que existe una gran semejanza con los nuestros. Señalemos que estos autores utilizan en sus trabajos energías monoparticulares  $1p-1h$

experimentales.

-A=15 (figuras 26-27):

En estas figuras no aparece representado el nivel  $3/2^-; 1/2$  obtenido con la correspondiente función  $0p-0h$ , y que resulta de valor 3.452 MeV para la CIY y 3.357 MeV para la FAHT.

Recordemos también que hemos señalado los primeros cinco niveles del espectro de paridad positiva, isoespín  $1/2$ , como espúreos.

-A=12 (figuras 34 y 35):

Los dos estados excitados  $2^+; 0$  y  $4^+; 0$ , asociados a la banda rotacional del estado fundamental, resultan más bajos que los correspondientes experimentales, especialmente el segundo de ellos.

La relación espectroscópica  $\frac{J'(J'+1)}{J(J+1)}$  toma para estos estados, frente al valor teórico  $10/3=3.33$ , los valores:

-Desarrollo CIY, funciones  $0p-0h$ : 3.40.

-Desarrollo CIY, funciones  $0p0h-2p2h$ : 3.57.

-Desarrollo FAHT, funciones  $0p-0h$ : 3.44.

-Desarrollo FAHT, funciones  $0p0h-2p2h$ : 3.60.

-A=11 (figuras 36-38):

Nuestro estado fundamental se asocia con los valores  $1/2^-; 1/2$ , frente a los experimentales  $3/2^-; 1/2$ . No obstante, obtenemos este segundo estado a muy poca distancia (0.2 MeV) del fundamental. Experimentalmente el primer nivel excitado de esta paridad e isoespín es el  $1/2^-; 1/2$  a 2.0 MeV para el  $^{11}\text{C}$ , 2.125 para el  $^{11}\text{B}$ .

-A=10 (figuras 39 y 40):

Estado fundamental teórico  $3^+; 0$ , el experimental es el  $1^+; 0$ . Este último aparece en nuestro cálculo como primer nivel excitado con aproximadamente 2 MeV de energía. Experimentalmente el primer nivel excitado  $1^+; 0$  aparece a 0.718 MeV ( $^{10}\text{B}$ ).

-A=8 (figuras 45 y 46):

En este caso, los dos niveles  $2^+;0$  y  $4^+;0$ , asociados a la banda rotacional del estado fundamental aparecen adecuadamente situados. La relación espectroscópica  $\frac{J'(J'+1)}{J(J+1)}$  toma, frente al valor teórico 3.33, los valores:

- Desarrollo CIY, funciones  $0p-0h$ : 3.38.
- Desarrollo CIY, funciones  $0p0h-2p2h$ : 3.40.
- Desarrollo FAHT, funciones  $0p-0h$ : 3.37.
- Desarrollo FAHT, funciones  $0p0h-2p2h$ : 3.38.

Respecto a los cálculos espectroscópicos mencionados anteriormente de Irvine et al. (IRV76), someramente los resultados son cualitativamente muy similares a los nuestros en todos los casos, destacando esta similitud especialmente en los núcleos  $A=12$  y  $A=8$ , donde los estados de la banda rotacional asociada al estado fundamental aparecen con las mismas características posicionales.

A	$\lambda_1^+$	$\lambda_1^-$	$\lambda_2^+$	$\lambda_2^-$	$\lambda_3^+$	$\lambda_3^-$	d(fm)
4	-0.275	--	-0.624	+0.430	--	--	2.948
5	-0.286	+0.134	-0.653	+0.491	+0.083	-0.165	2.849
6	-0.295	+0.151	-0.679	+0.545	+0.090	-0.179	2.763
7	-0.305	+0.170	-0.705	+0.597	+0.096	-0.191	2.695
8	-0.321	+0.201	-0.749	+0.684	+0.106	-0.212	2.590
9	-0.321	+0.204	-0.750	+0.688	+0.107	-0.214	2.585
10	-0.327	+0.219	-0.768	+0.724	+0.112	-0.223	2.550
11	-0.333	+0.231	-0.782	+0.754	+0.116	-0.230	2.510
12	-0.341	+0.249	-0.804	+0.798	+0.121	-0.239	2.470
13	-0.342	+0.253	-0.807	+0.805	+0.123	-0.242	2.466
14	-0.346	+0.263	-0.818	+0.826	+0.125	-0.246	2.448
15	-0.350	+0.274	-0.829	+0.849	+0.128	-0.252	2.423
16	-0.352	+0.279	-0.834	+0.860	+0.130	-0.255	2.416

$\hbar\omega=15$  MeV  $k_p=0.4$

TABLA 1

Multiplicadores de Lagrange y distancias de healing

A	$J^{\pi}; T$ exp.	$J^{\pi}; T$ teó.	$E_p$ (MeV)	$E_0$ (MeV)	$E_2$ (MeV)
4	$0^+; 0$	$0^+; 0$	-23.834	-23.834	---
5	$3/2^-; 1/2$	$3/2^-; 1/2$	-17.161	-18.020	---
6	$1^+; 0$	$1^+; 0$	-13.260	-21.318	-23.117
7	$3/2^-; 1/2$	$0: 3/2^-; 1/2$ $2: 1/2^-; 1/2$	-11.484	-23.490	-25.138 {-24.981}
8	$0^+; 0$	$0^+; 0$	-27.508	-30.329	-32.497
9	$3/2^-; 1/2$	$3/2^-; 1/2$	-14.840	-32.332	-33.323
10	$3^+; 0$	$1^+; 0$	-19.999	-37.368 {-35.618}	-38.048 {-36.758}
11	$3/2^-; 1/2$	$1/2^-; 1/2$	-28.073	-44.834 {-44.632}	-45.592 {-45.246}
12	$0^+; 0$	$0^+; 0$	-53.779	-57.427	-61.394
13	$1/2^-; 1/2$	$1/2^-; 1/2$	-50.743	-62.170	-64.190
14	$1^+; 0$	$1^+; 0$	-65.614	-72.549	-77.225
15	$1/2^-; 1/2$	$1/2^-; 1/2$	-82.345	-84.162	-92.568
16	$0^+; 0$	$0^+; 0$	-102.766	-102.766	-112.015

$\hbar\omega=15$  MeV  $k_p=0.4$  CIY

TABLA 2

Energías de los estados fundamentales

$E_p$  = energía según expresión (6.16)

$E_0$  = energía con funciones 0p-0h

$E_2$  = energía con funciones 0p-0h y 2p-2h

A	$J^\pi; T$ exp.	$J^\pi; T$ te6.	$\text{Dim}_0$	$\text{Dim}_2$	$E_0$ (MeV)	$E_2$ (MeV)
4	$0^+; 0$	$0^+; 0$	1	-	-7.293	---
5	$3/2^-; 1/2$	$3/2^-; 1/2$	1	-	-4.984	---
6	$1^+; 0$	$1^+; 0$	3	8	-7.971	-9.134
7	$3/2^-; 1/2$	$0: 3/2^-; 1/2$ $2: 1/2^-; 1/2$	5	30 {44}	-10.404	-11.636 {-11.479}
8	$0^+; 0$	$0^+; 0$	5	45	-18.151	-19.891
9	$3/2^-; 1/2$	$3/2^-; 1/2$	13	106	-20.115	-20.947
10	$3^+; 0$	$1^+; 0$	10 (10)	73 (90)	-25.803 (-24.219)	-26.388 (-25.220)
11	$3/2^-; 1/2$	$1/2^-; 1/2$	8 (13)	63 (106)	-33.370 (-33.135)	-34.041 (-33.707)
12	$0^+; 0$	$0^+; 0$	5	179	-46.467	-49.993
13	$1/2^-; 1/2$	$1/2^-; 1/2$	5	126	-51.430	-53.345
14	$1^+; 0$	$1^+; 0$	3	180	-62.135	-66.376
15	$1/2^-; 1/2$	$1/2^-; 1/2$	1	178	-74.722	-81.945
16	$0^+; 0$	$0^+; 0$	1	41	-92.501	-100.961

$\hbar\omega=15$  MeV  $k_p=0.4$  FAHT

TABLA 3

Energías de los estados fundamentales

$E_0$  = energía con funciones 0p-0h

$E_2$  = energía con funciones 0p-0h y 2p-2h

A	$n_p$ (libre)	$J^n; T$	$n_p$	Dim.	$E_{CIY}$ (MeV)	$E_{FAHT}$ (MeV)
8	0	$0^+; 0$ (GS)	0p-0h	5	-30.329	-18.151
			2	22	-31.261	-18.920
			1	37	-32.393	-19.821
			0	45	-32.497	-19.891
		$2^+; 0$	0p-0h	8	-27.573	-15.688
			2	53	-28.647	-16.581
			1	101	-29.412	-17.174
			0	118	-29.510	-17.244
		$4^+; 0$	0p-0h	3	-20.998	-9.833
			2	34	-21.769	-10.485
			1	62	-22.288	-10.898
			0	70	-22.338	-10.935
9	0	$3/2^-; 1/2$ (GS)	0p-0h	13	-32.332	-20.115
			3	106	-33.323	-20.947
		$1/2^-; 1/2$	0p-0h	8	-30.231	-18.092
			3	63	-30.687	-18.478
			2	169	-32.064	-19.603
		$5/2^-; 1/2$	0p-0h	11	-30.221	-18.211
3	113		-31.410	-19.212		
10	0	$1^+; 0$ (GS)	0p-0h	5	-37.368	-25.803
			4	73	-38.048	-26.388
		$3^+; 0$	0p-0h	10	-35.618	-24.219
			4	90	-36.758	-25.220
11	1	$1/2^-; 1/2$ (GS)	0p-0h	8	-44.834	-33.370
			5	63	-45.592	-34.041
		$3/2^-; 1/2$	0p-0h	13	-44.632	-33.135
			5	106	-45.246	-33.707

TABLA 4

A	$n_p$ (libre)	$J^\pi; T$	$n_p$	Dim.	$E_{CIY}$ (MeV)	$E_{FAHT}$ (MeV)
12	2	$0^+; 0$ (GS)	Op-0h	5	-57.427	-46.467
			6	22	-57.806	-46.827
			5	77	-59.418	-48.253
			4	179	-61.394	-49.993
		$2^+; 0$	Op-0h	8	-54.684	-35.396
			6	53	-55.103	-44.271
		$4^+; 0$	Op-0h	3	-48.074	-37.544
			6	34	-48.155	-37.609
			5	180*	-49.610	-38.955
		13	3	$1/2^-; 1/2$ (GS)	Op-0h	5
7	20				-62.519	-51.772
6	126				-64.190	-53.345
$3/2^-; 1/2$	Op-0h			5	-61.928	-51.209
	7			29	-61.997	-51.270
$5/2^-; 1/2$	Op-0h			8	-58.581	-48.011
	7			28	-58.651	-48.075
14	4	$1^+; 0$ (GS)	Op-0h	3	-72.549	-62.135
			8	8	-72.562	-62.147
			7	47	-73.838	-63.370
			6	180*	-77.225	-66.376
		$2^+; 0$	Op-0h	1	-70.199	-59.950
			8	4	-70.199	-59.950
			7	52	-70.647	-60.337
		$0^+; 0$	7	15	-39.250	-31.396
			6	57	-46.916	-37.735
			5	112	-50.463	-40.927
			4	128	-51.193	-41.676

TABLA 4 (Cont.)

A	$n_p$ (libre)	J ; T	$n_p$	Dim.	$E_{CIY}$ (MeV)	$E_{FAHT}$ (MeV)
15	5	$1/2^-; 1/2$ (GS)	0p-0h	1	-84.162	-74.722
			8	11	-85.035	-75.092
			7	72	-89.152	-78.843
		$3/2^-; 1/2$	6	178	-92.568	-81.945
			0p-0h	1	-81.210	-71.365
			8	16	-81.210	-71.365
16	6	$0^+; 0$ (GS)	7	115	-82.186	-73.899
			0p-0h	1	-102.766	-92.501
			8	9	-103.654	-93.283
			7	24	-108.801	-98.020
		$2^+; 0$	6	41	-112.015	-100.961
			8	17	-66.158	-58.596
			7	65	-77.248	-68.270
6	110	-83.713	-73.899			

$$\hbar\omega = 15 \text{ MeV} \quad k_p = 0.4$$

TABLA 4 (Cont.)

Energías para distintos estados como función del parámetro  $n_p$ , indicativo del número de partículas que permanecen en capa  $0p_{3/2}$  en todas las funciones.

(\*) Valores correctos para estas dimensiones:

-A=12, J =  $4^+$ , T=0 : Dim.=184.

-A=14, J =  $1^+$ , T=0 : Dim.=183.

A	$E_{\text{exp.}} (\text{MeV})$	CIY		FAHT
		$E_p (\text{MeV})$	$E_0 (\text{MeV})$	$E_0 (\text{MeV})$
4	7.074	8.772	8.772	4.636
5	5.367	5.432	5.854	3.247
6	5.332	4.085	5.428	3.204
7	5.489	3.248	4.963	3.093
8	7.062	4.845	5.197	3.675
9	6.359	2.899	4.842	3.485
10	6.475	3.124	4.862	3.705
11	6.800	3.575	5.099	4.162
12	7.680	5.420	5.724	4.810
13	7.354	4.768	5.647	4.821
14	7.476	5.491	5.986	5.242
15	7.582	6.240	6.361	5.732
16	7.976	7.126	7.126	6.484

$$\hbar\omega = 15 \text{ MeV} \quad k_p = 0.4$$

TABLA 5

Energías por partícula en el estado  
fundamental con corrección de centro  
de masas.

$E_p$  = energías según expresión (6.16)

$E_0$  = energías con funciones  $0p-0h$

A	CIY			FAHT		
	$E_0$ (MeV)	$E_2$ (MeV)	$\Delta E$ (MeV)	$E_0$ (MeV)	$E_2$ (MeV)	$\Delta E$ (MeV)
6	3.553	3.853	0.300	1.329	1.522	0.193
7	3.356	3.591	0.235	1.486	1.662	0.176
8	3.791	4.062	0.271	2.269	2.486	0.217
9	3.592	3.703	0.111	2.235	2.327	0.092
10	3.737	3.805	0.068	2.580	2.639	0.059
11	4.076	4.145	0.069	3.037	3.095	0.058
12	4.780	5.116	0.330	3.872	4.166	0.294
13	4.782	4.938	0.156	3.956	4.104	0.148
14	5.182	5.516	0.334	4.438	4.741	0.303
15	5.611	6.171	0.560	4.982	5.463	0.481
16	6.423	7.001	0.578	5.781	6.310	0.529

Energías por partícula en el estado fundamental

$$\hbar\omega = 15 \text{ MeV} \quad k_p = 0.4$$

$E_{0(2)}$  = energías con funciones 0p-0h (0p-0h y 2p-2h)

A	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16
$n_p$ lib.	0	0	0	0	0	1	2	3	4	5	6
$n_p$ cál.	0	0	0	3	4	5	4	6	6	6	6
$\Delta n_p$	0	0	0	3	4	4	2	3	2	1	0

Valores del parámetro  $n_p$  (lib.=libre; cál.=usado en el cálculo)

TABLA 6

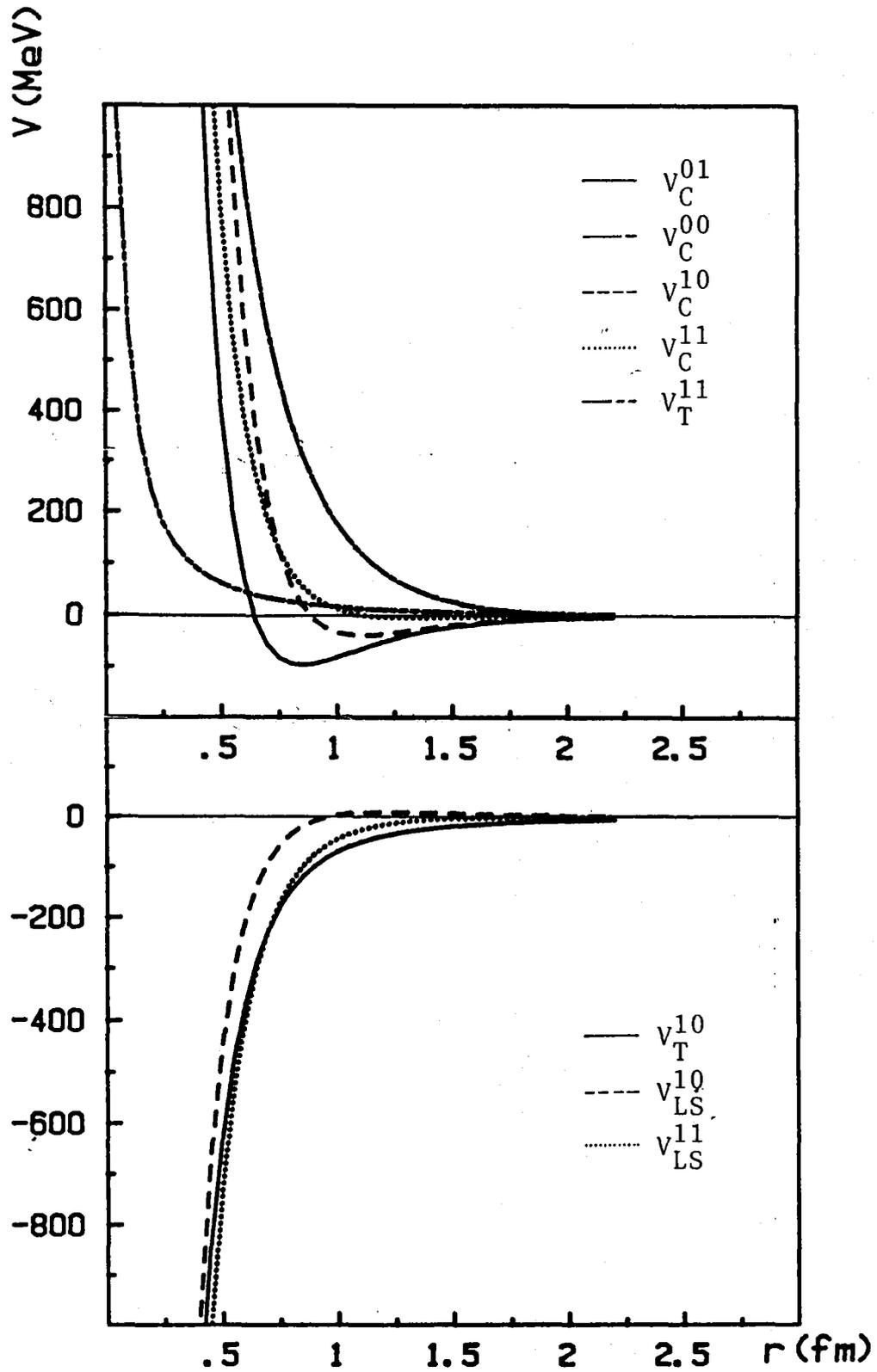
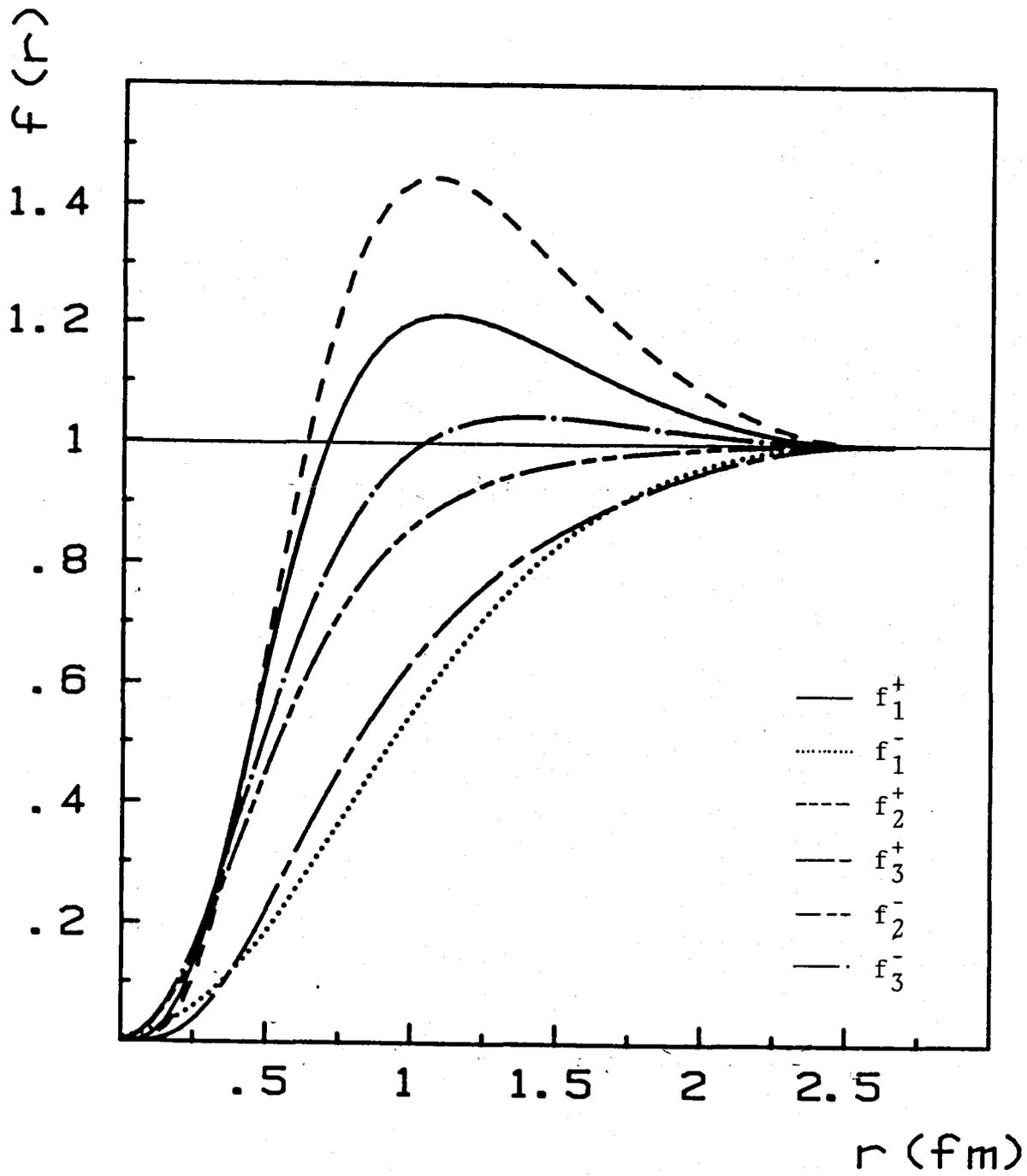


FIGURA 1

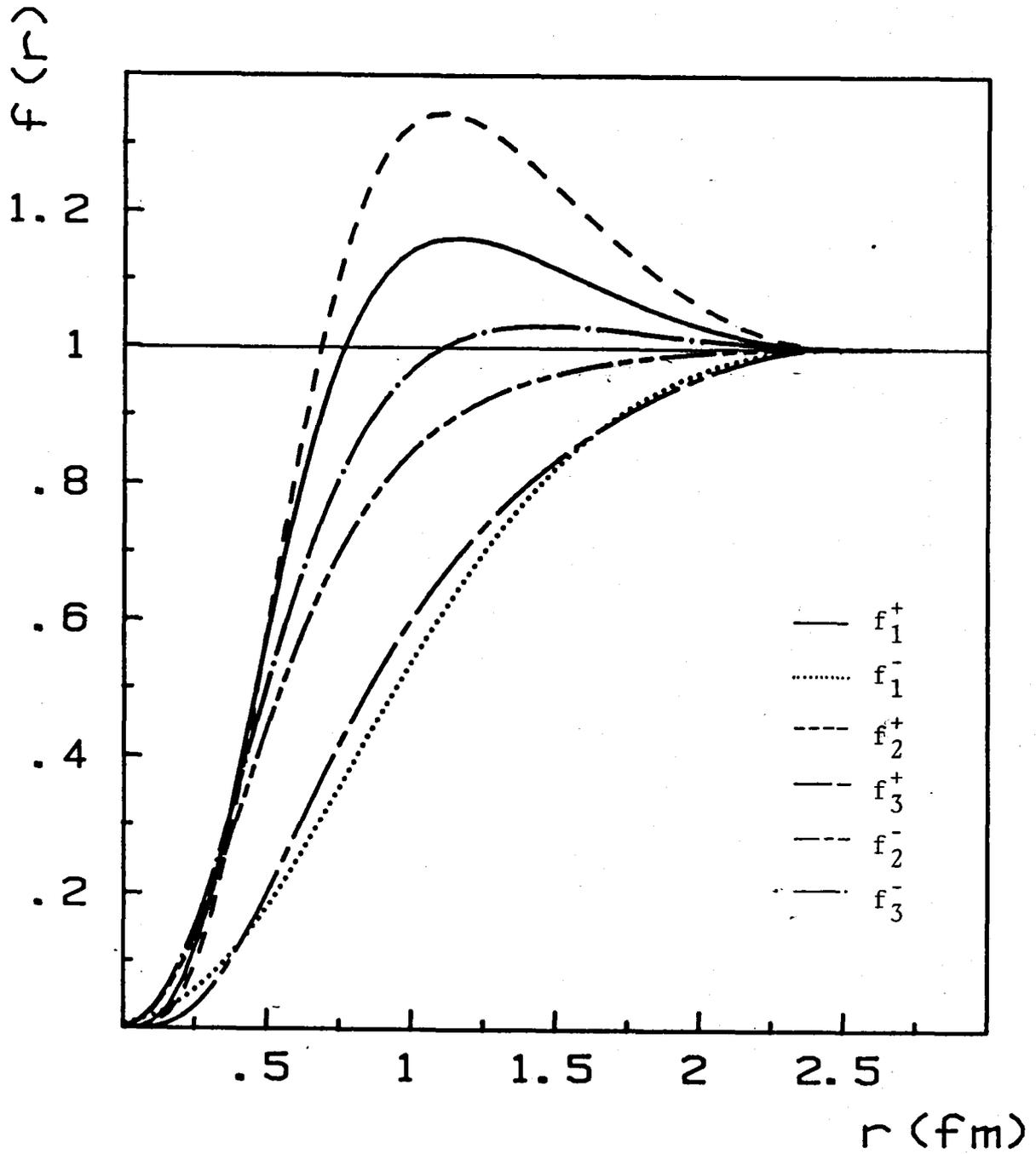
Potencial Reid V-8



A=9  $d=2.585$  fm

FIGURA 2

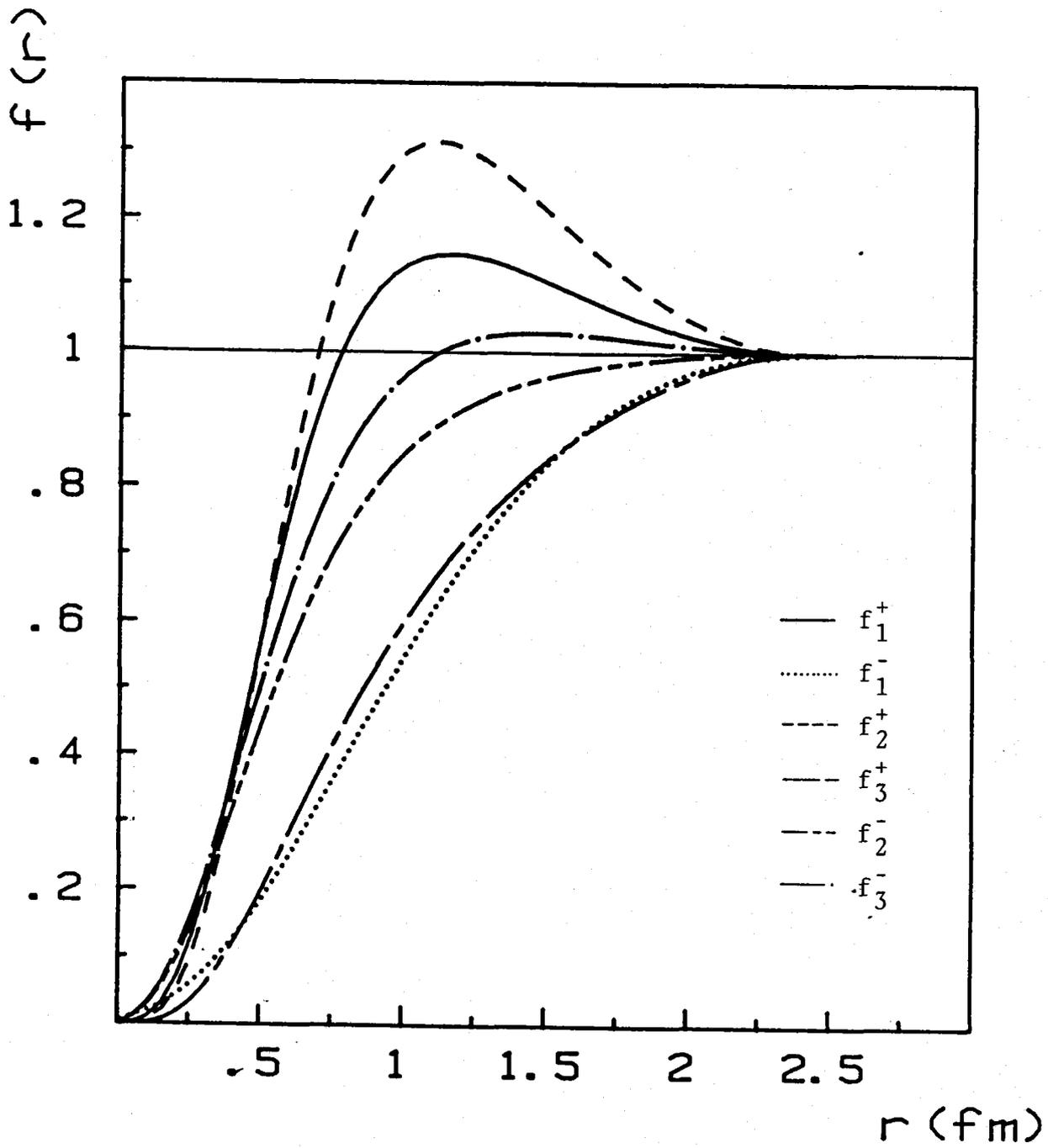
Factor de correlación  $F_2(1,2)$



$A=12$   $d=2.470$  fm

FIGURA 3

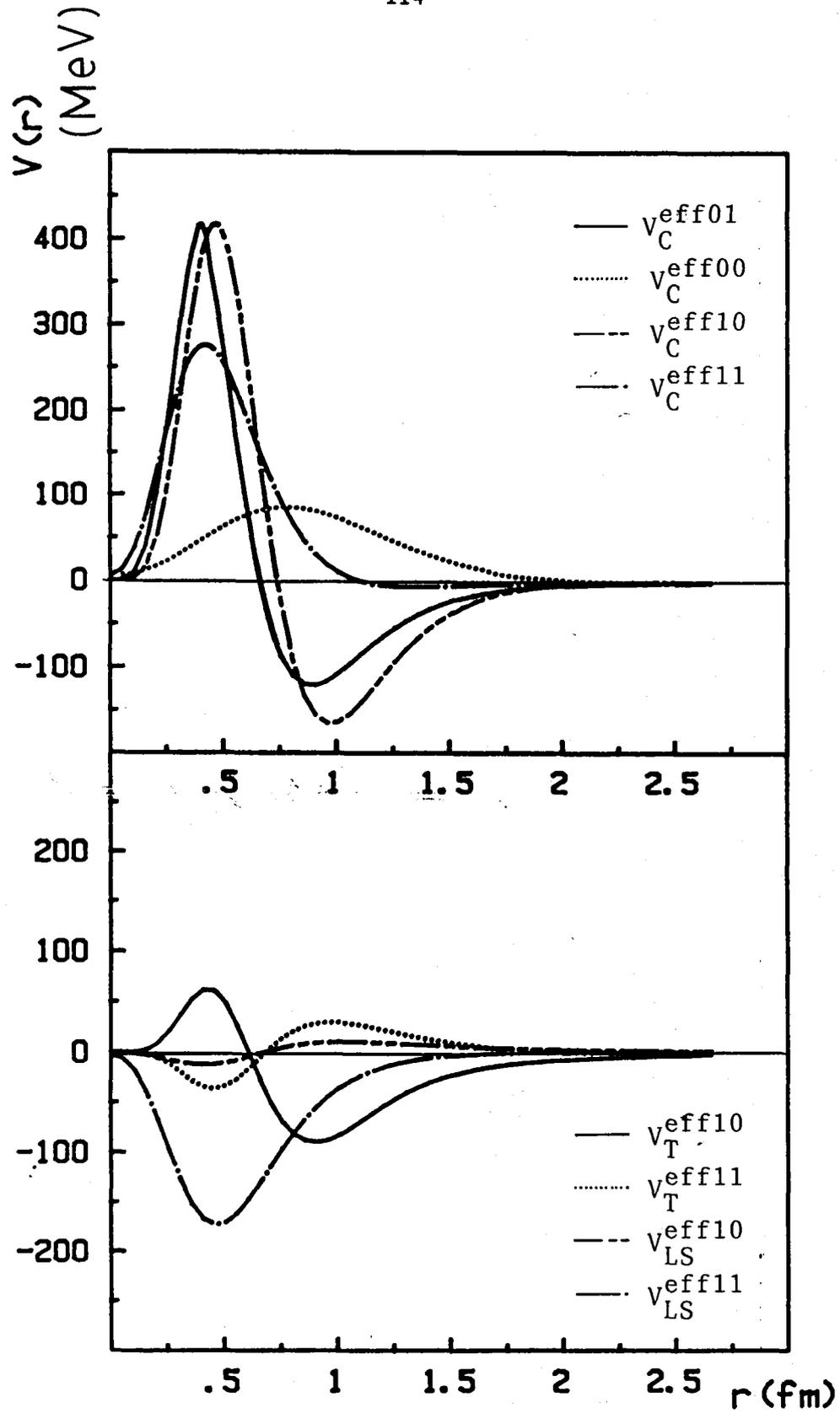
Factor de correlación  $F_2(1,2)$



$A=16$   $d=2.416$  fm

FIGURA 4

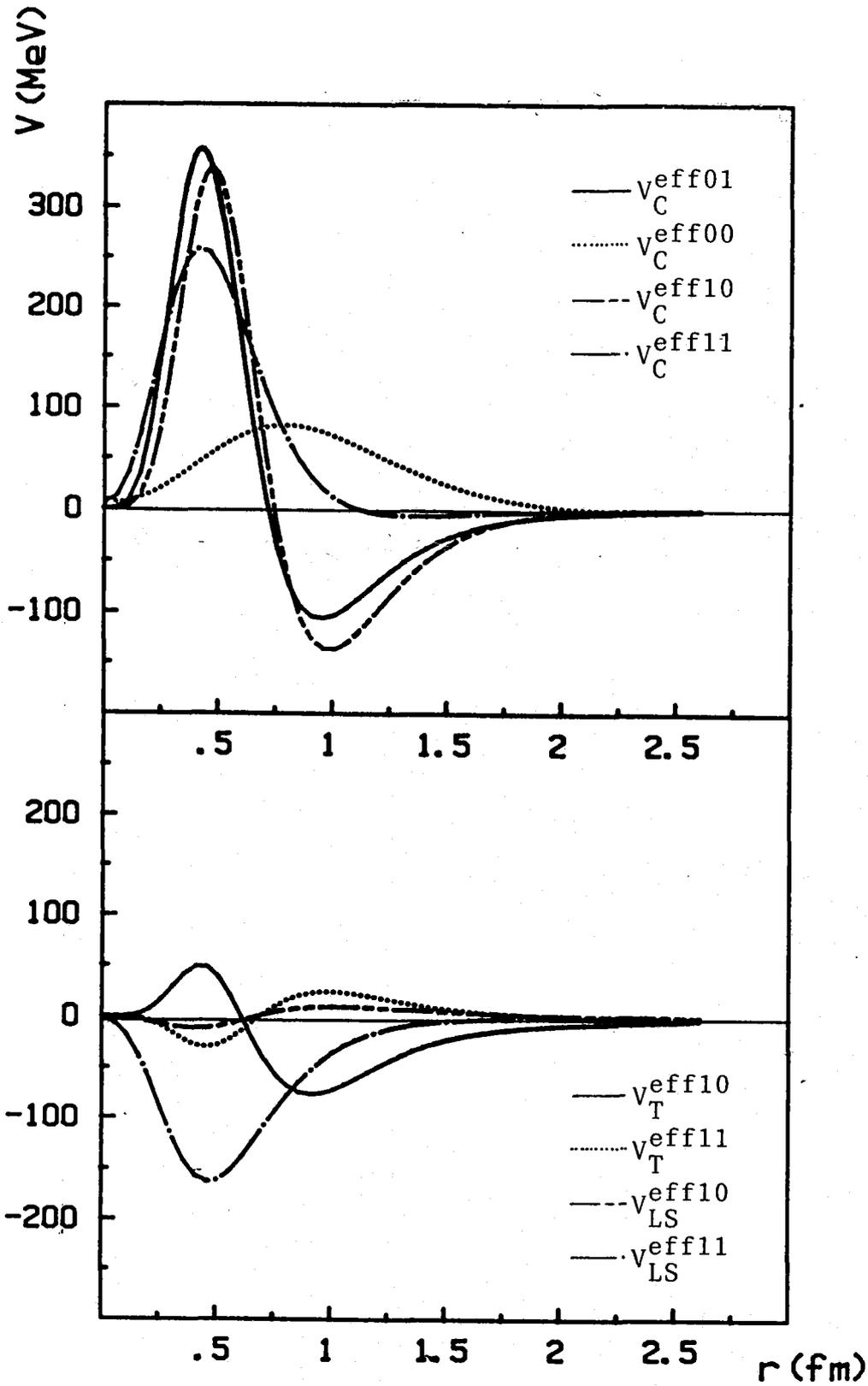
Factor de correlación  $F_2(1,2)$



$A=9$   $d=2.585$  fm

FIGURA 5

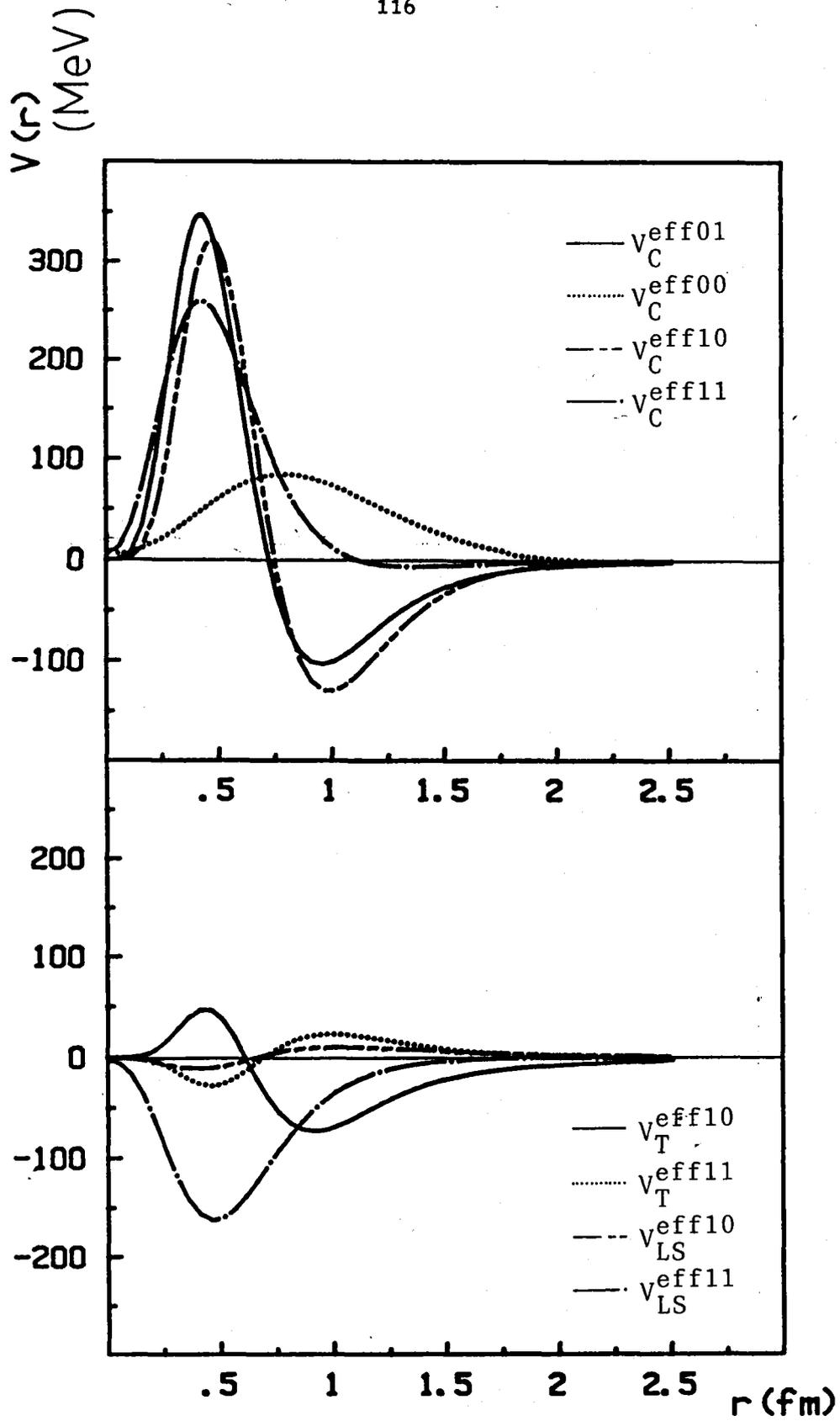
Potencial efectivo



$A=12$   $d=2.470$  fm

FIGURA 6

Potencial efectivo



$A=16$   $d=2.416$  fm

FIGURA 7

Potencial efectivo

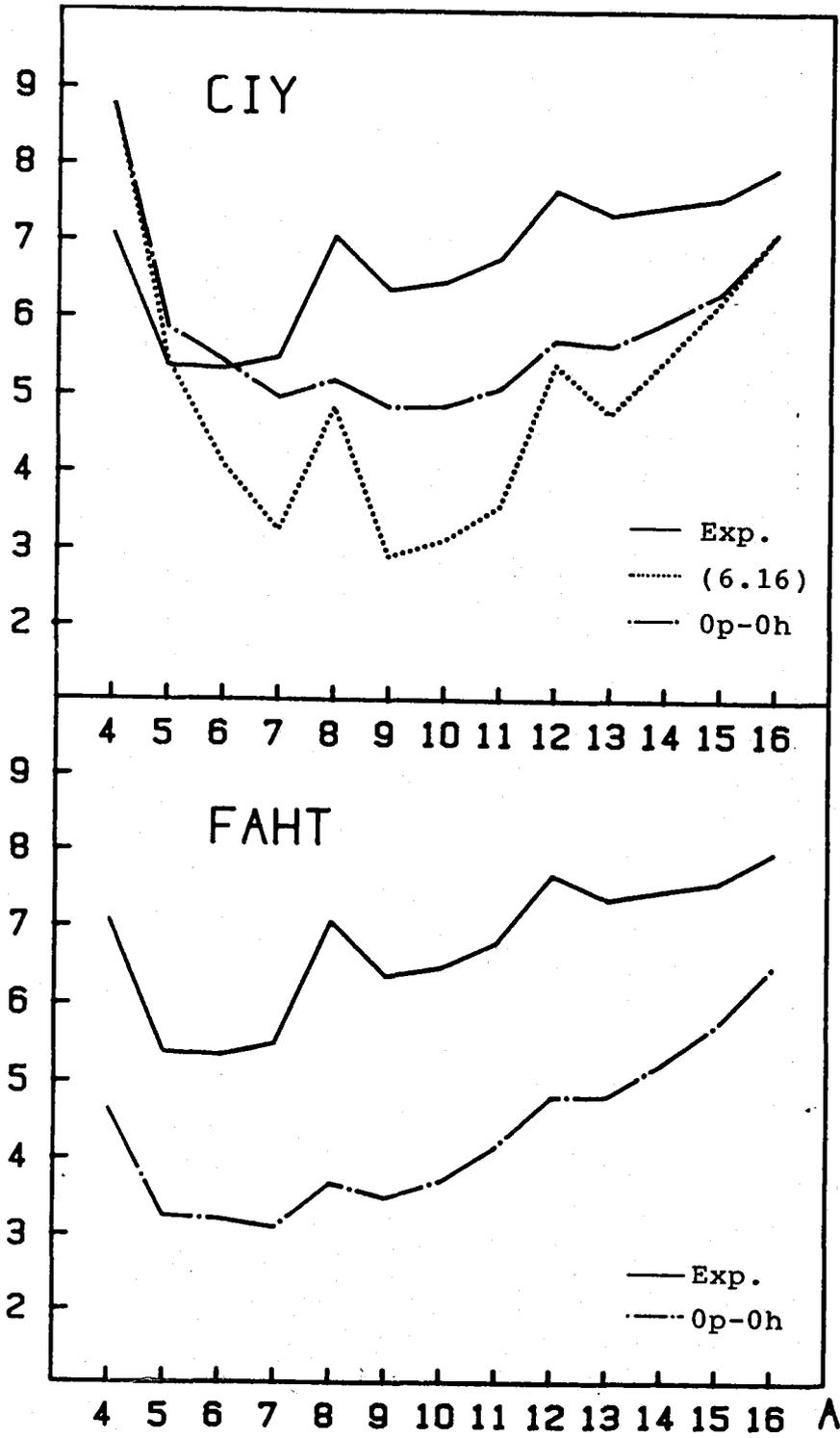
$E_B/A$  (MeV)


FIGURA 8a

Energía por partícula en el estado fundamental

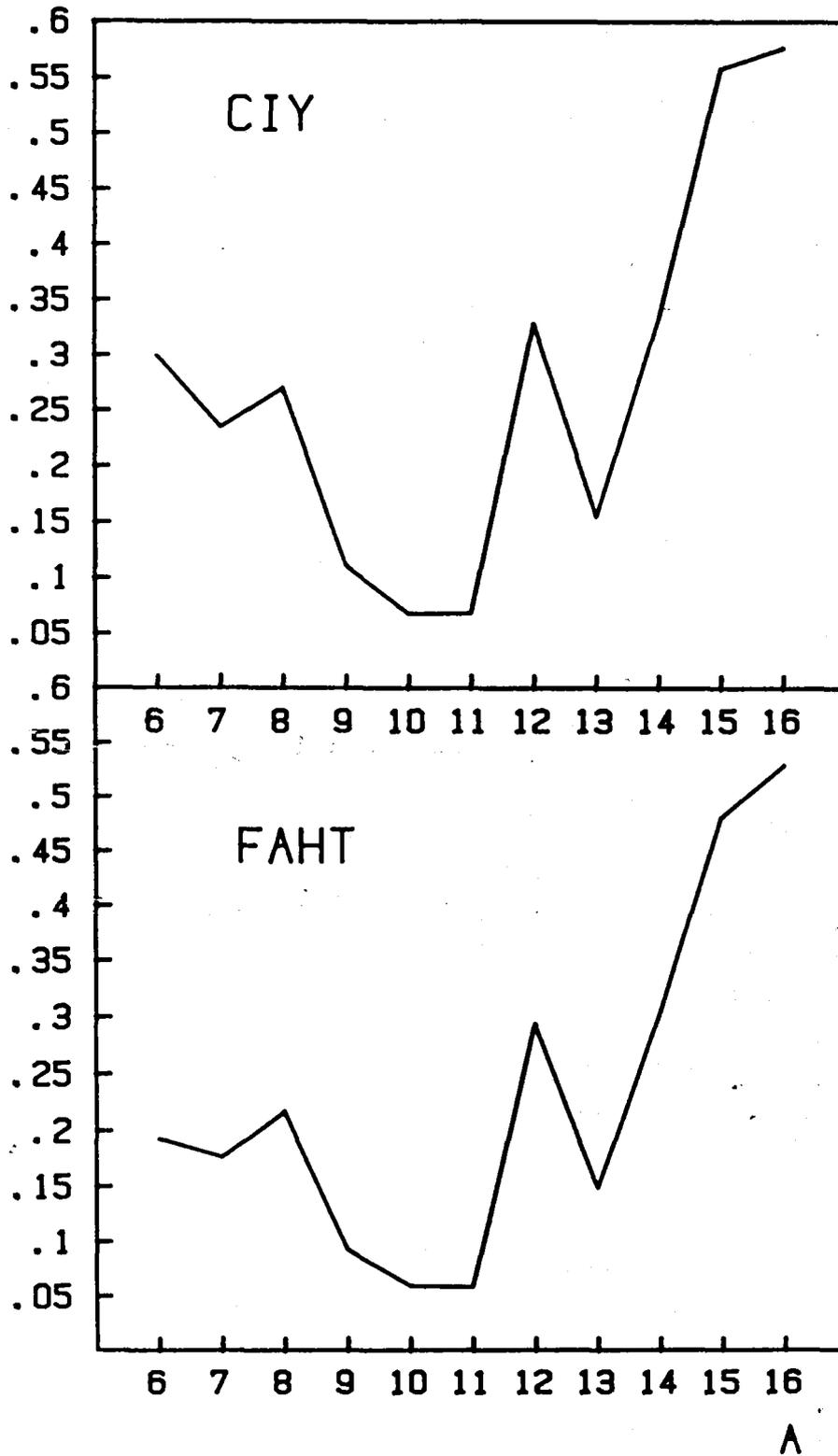
$\Delta E/A$  (MeV)

FIGURA 8b

Incremento de la energía por partícula provocado por la inclusión de funciones 2p-2h

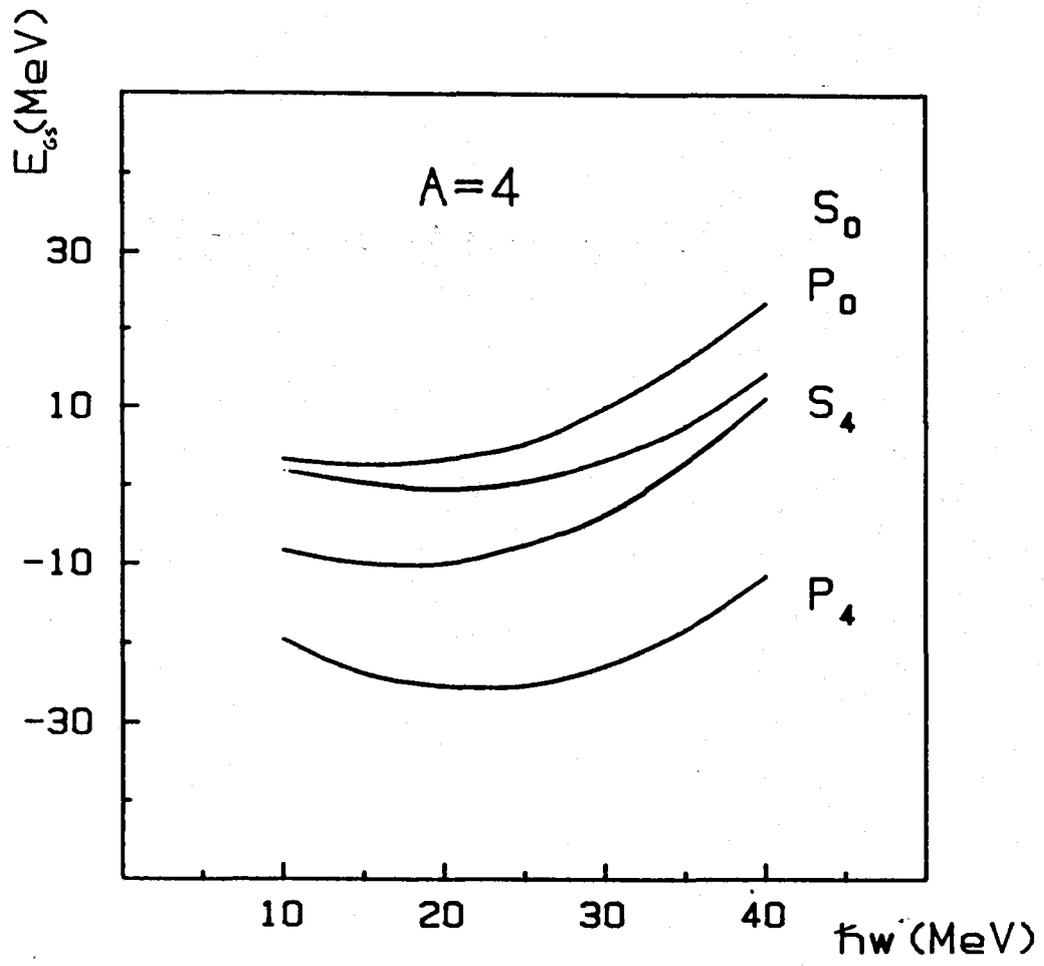


FIGURA 9

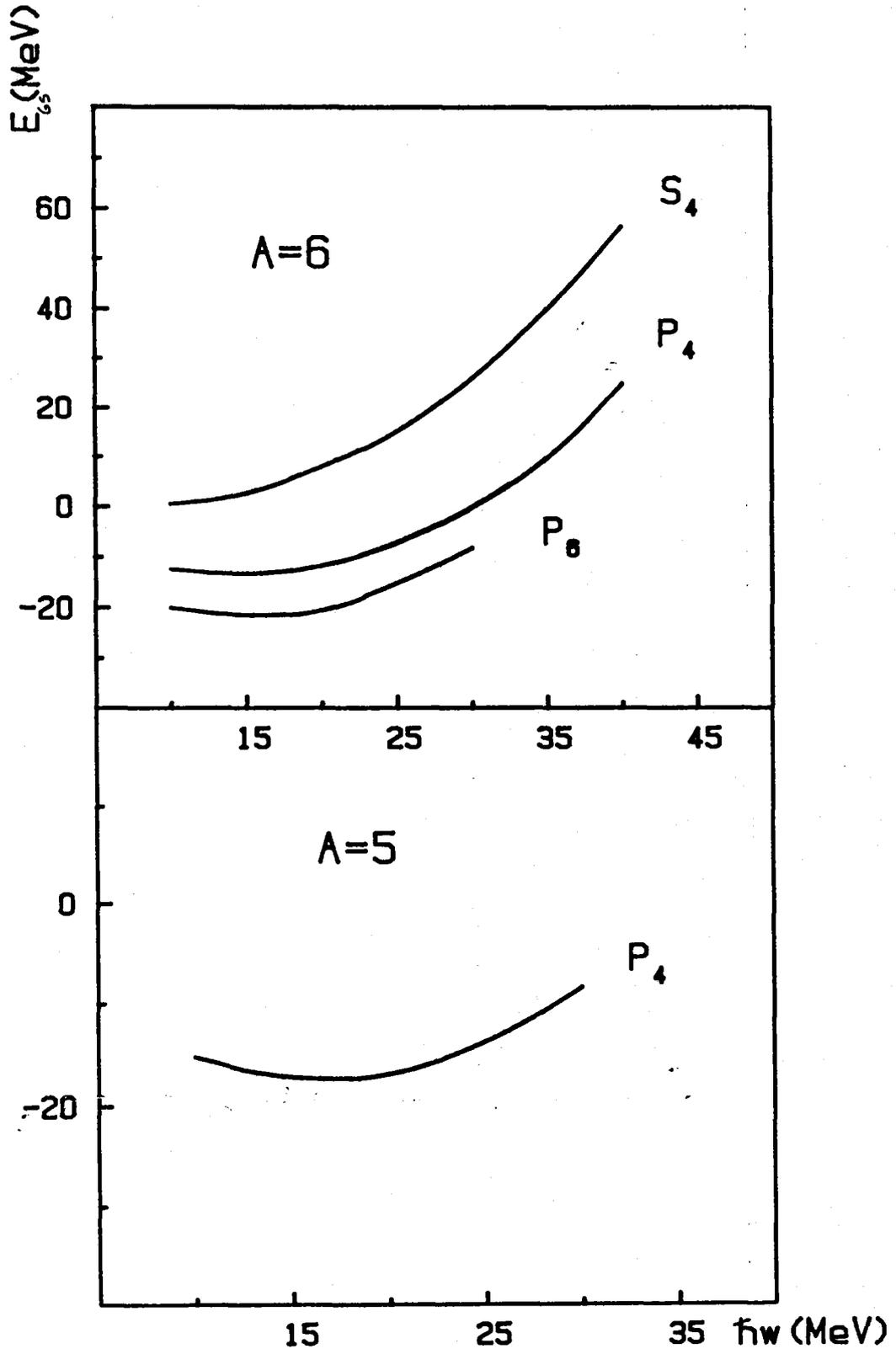


FIGURA 10

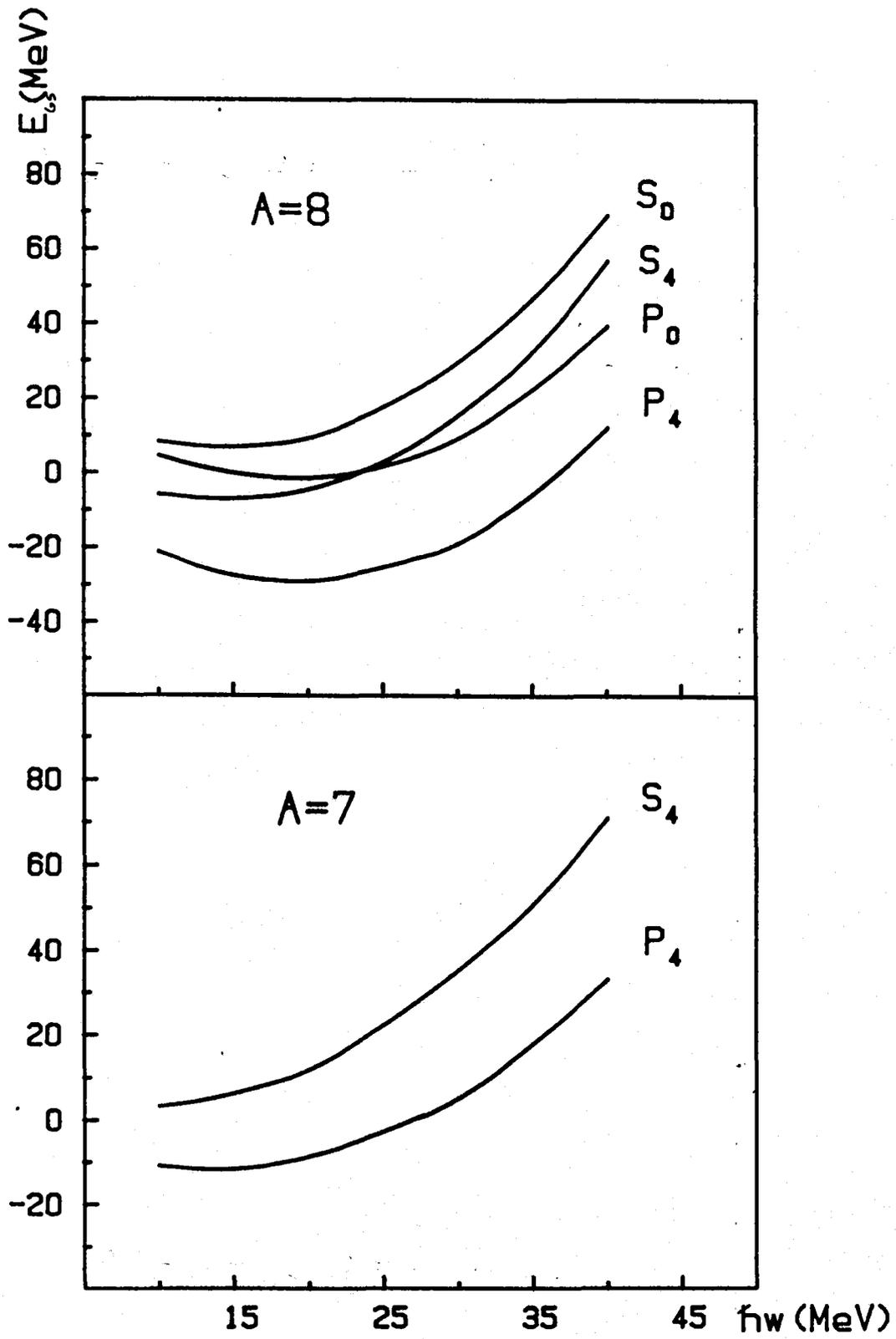


FIGURA 11

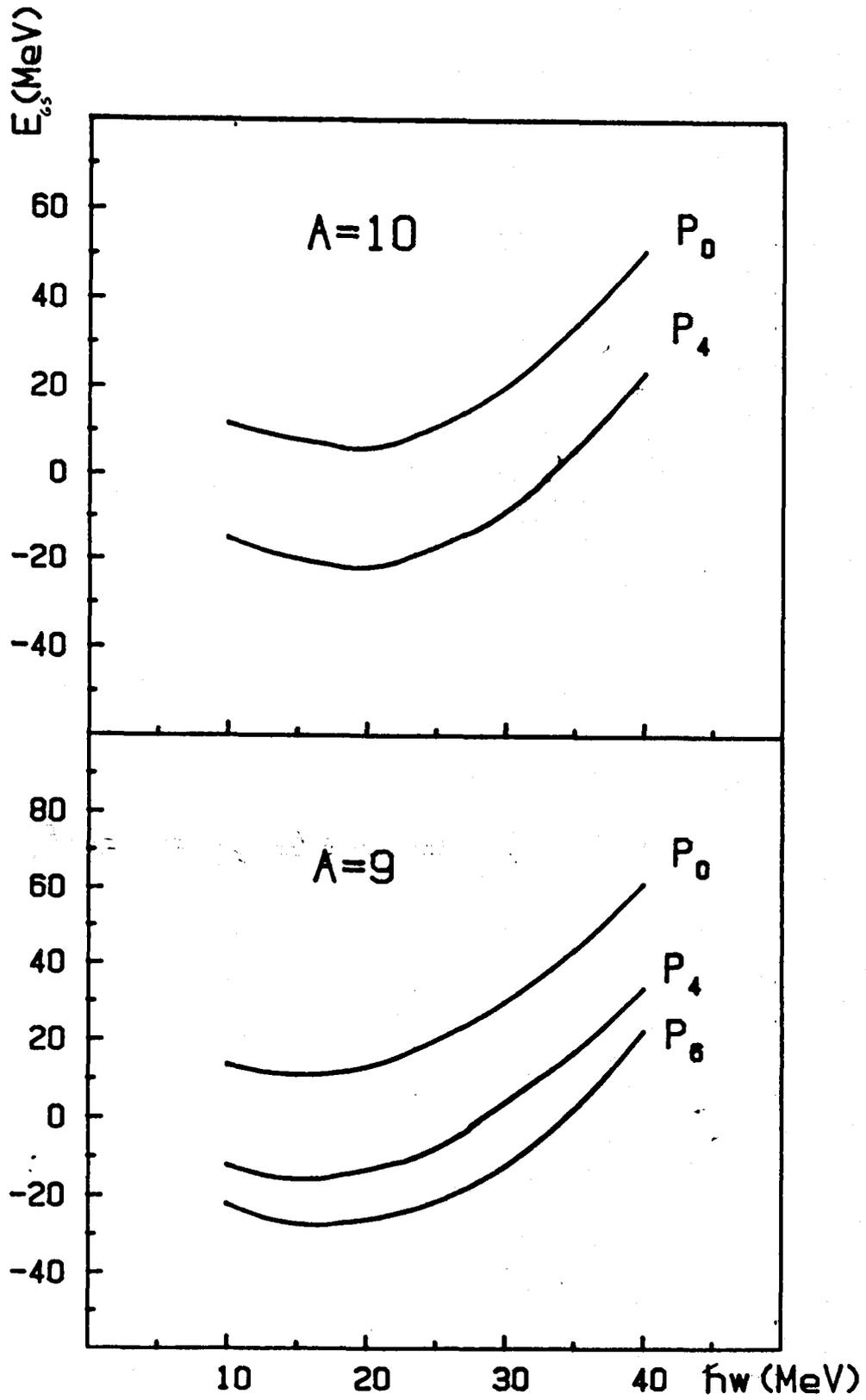


FIGURA 12

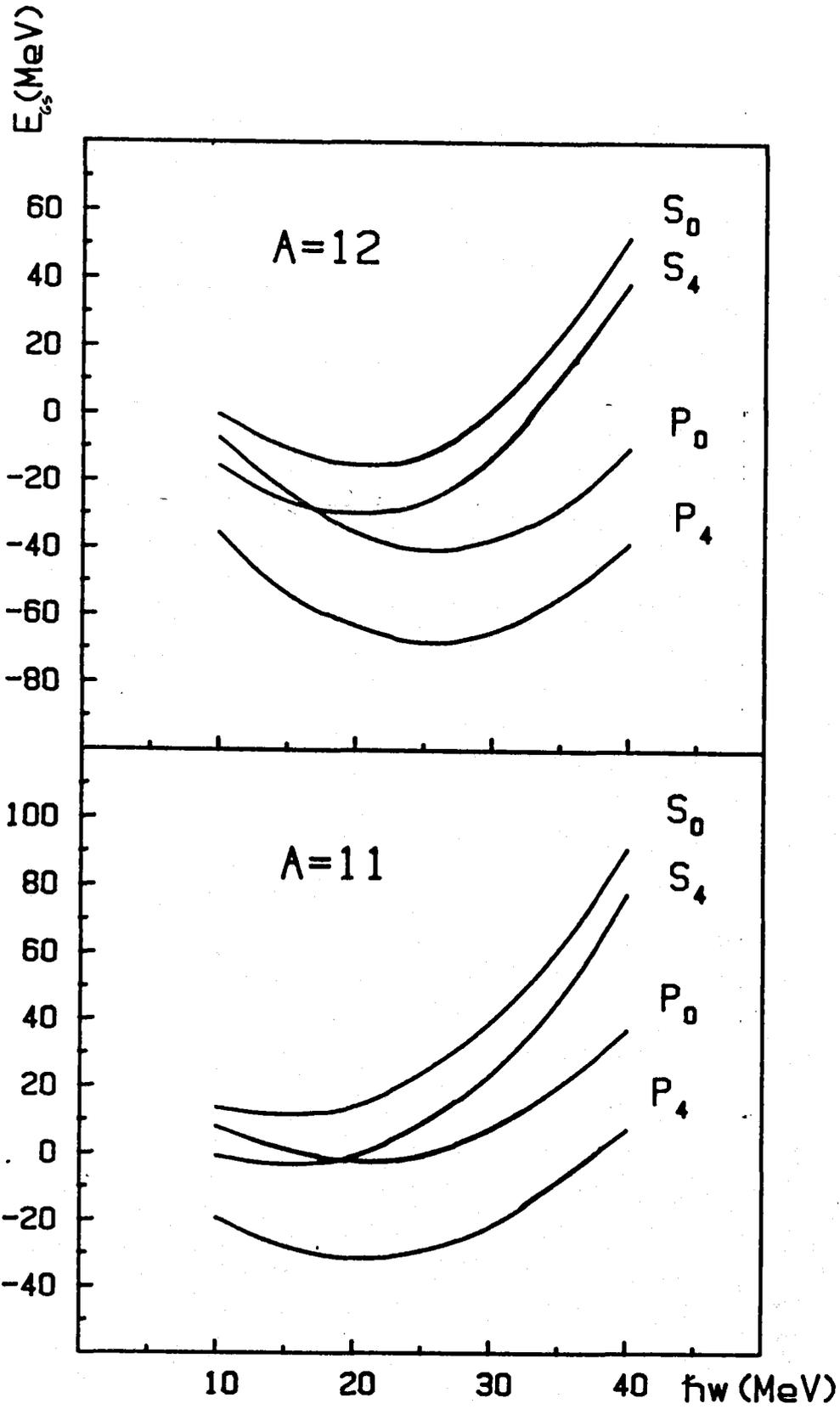


FIGURA 13

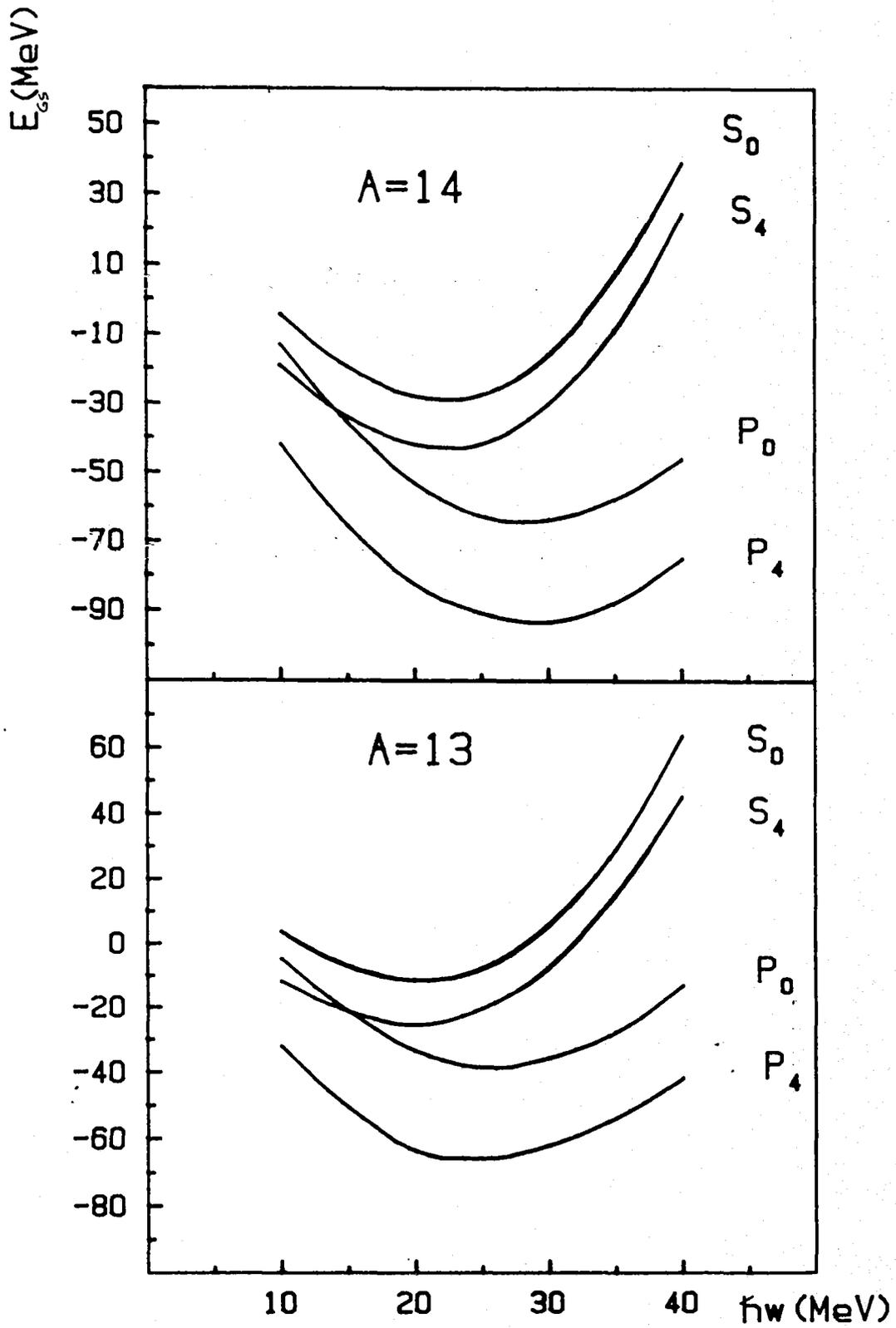


FIGURA 14

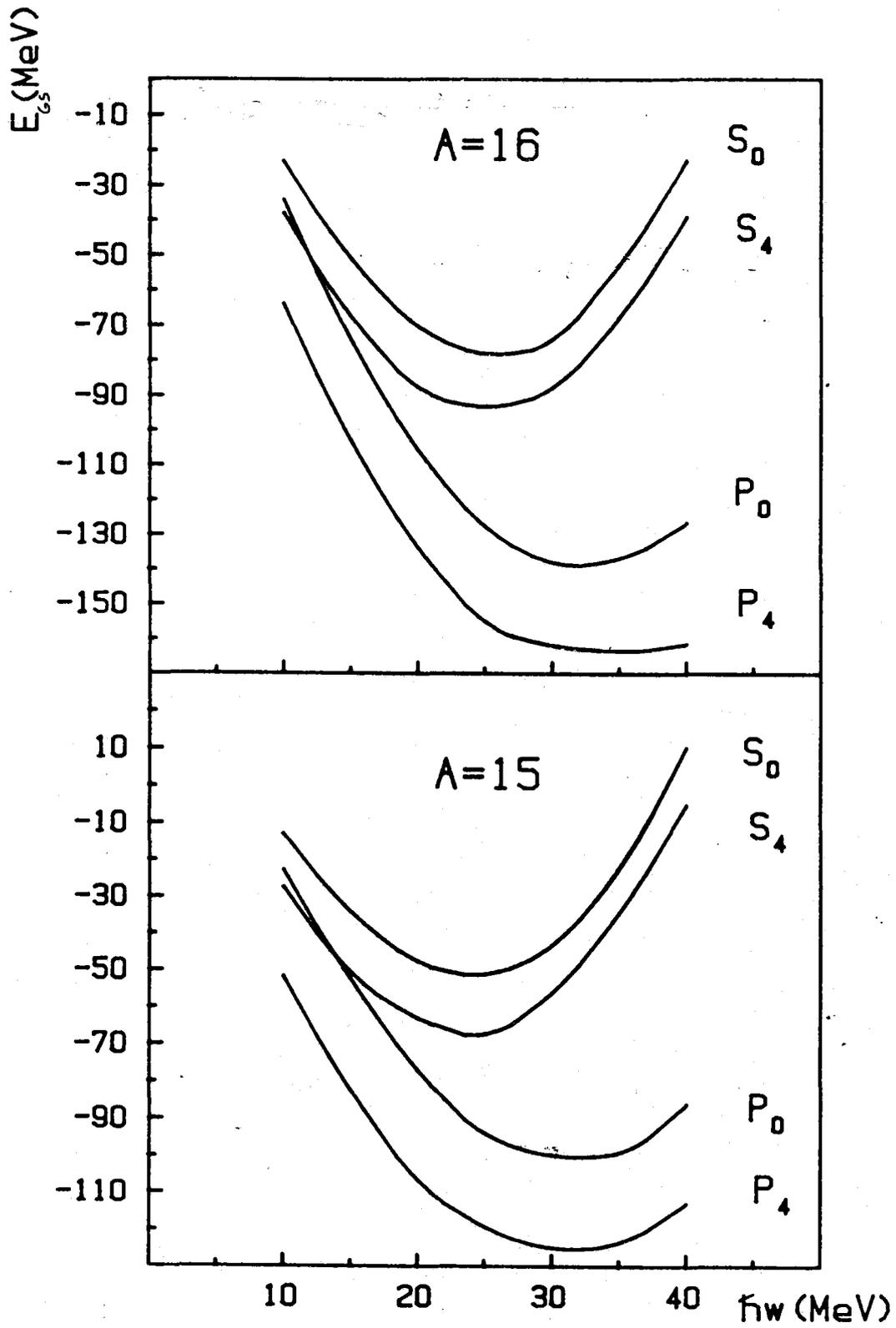


FIGURA 15

A=16 T=0  $\eta=+$  CIY

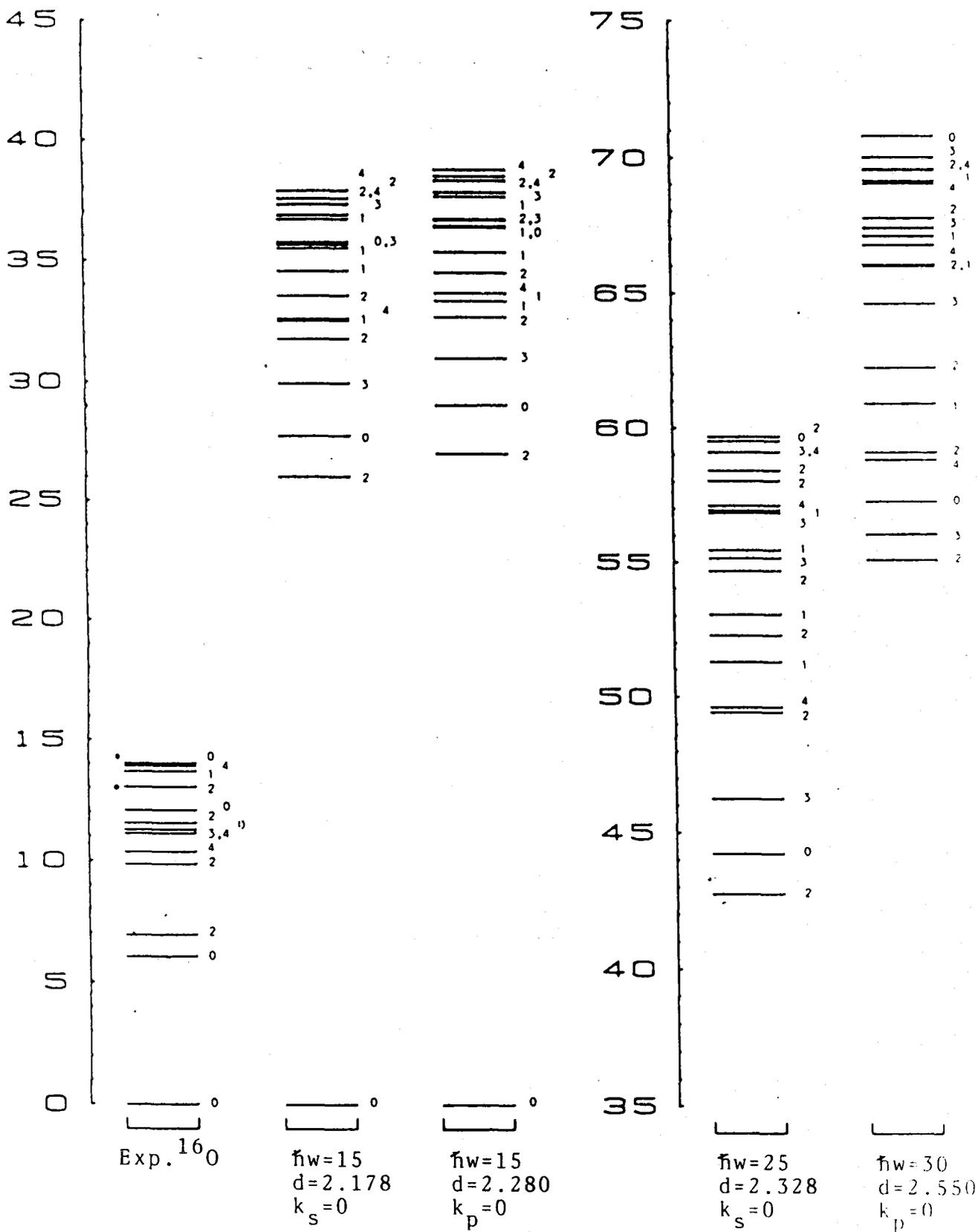


FIGURA 16

A=16 T=0  $\square=+$  FAHT

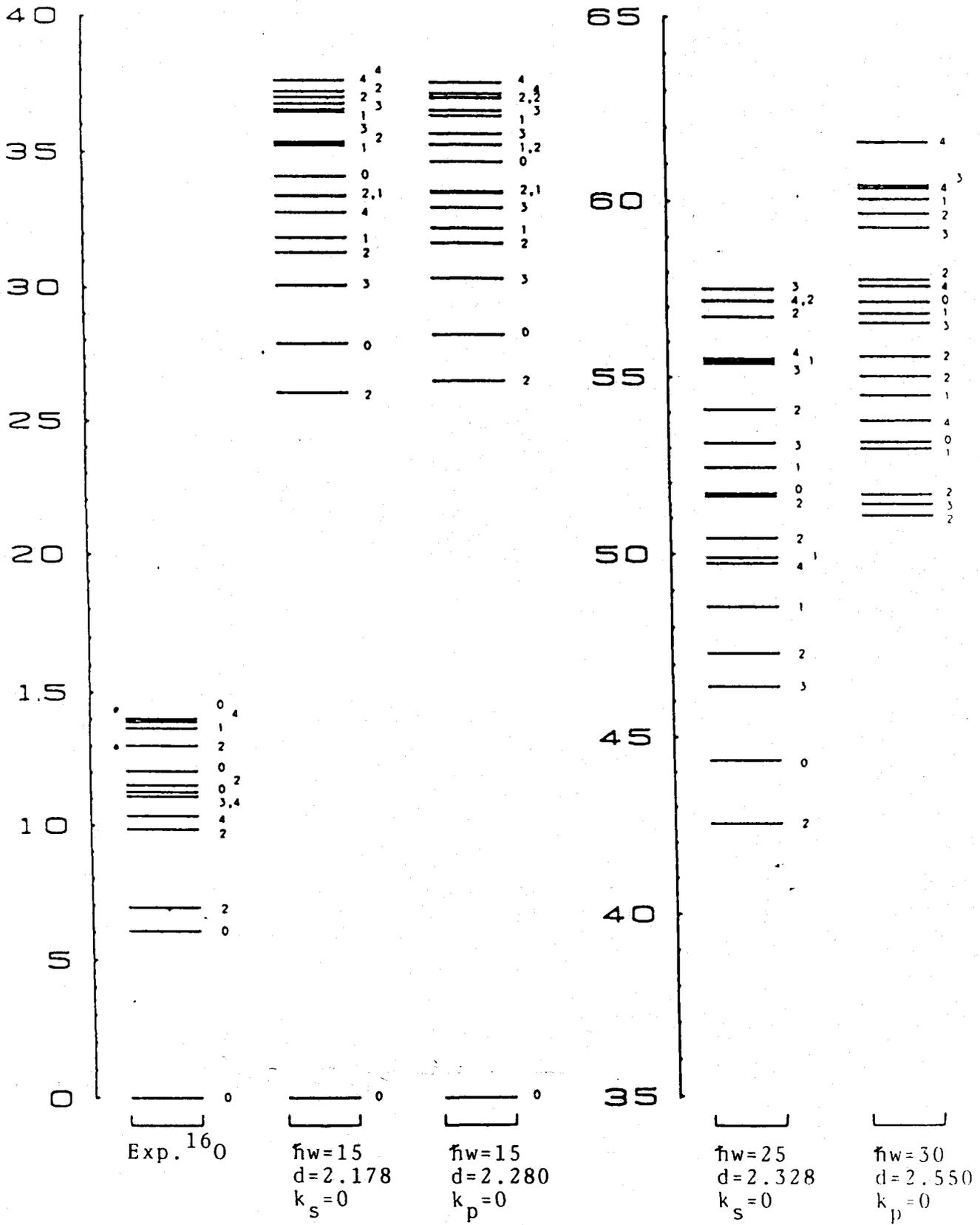


FIGURA 17

A=16 T=1  $\square = +$  CIY

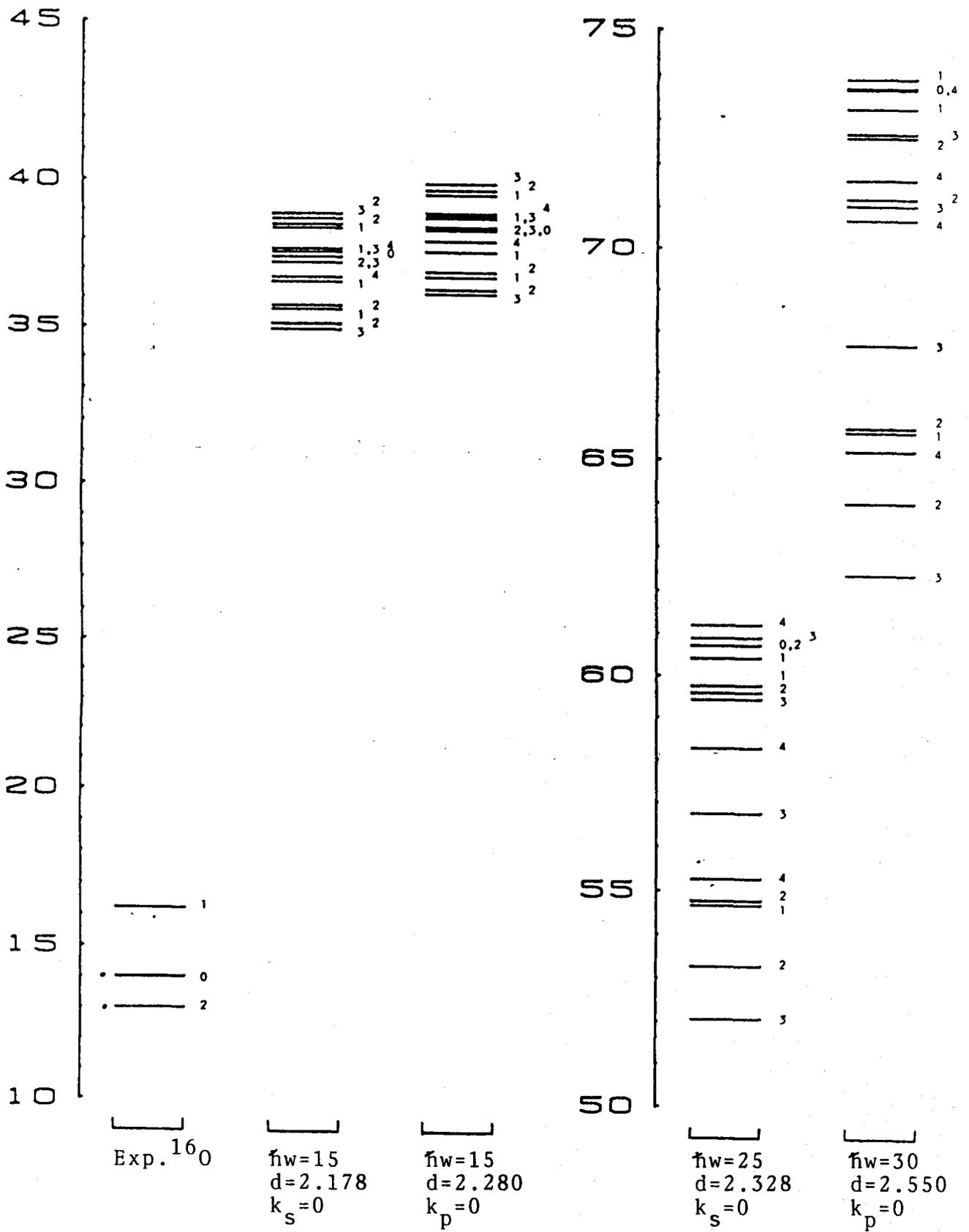


FIGURA 18

A=16 T=1  $\square = +$  FAHT

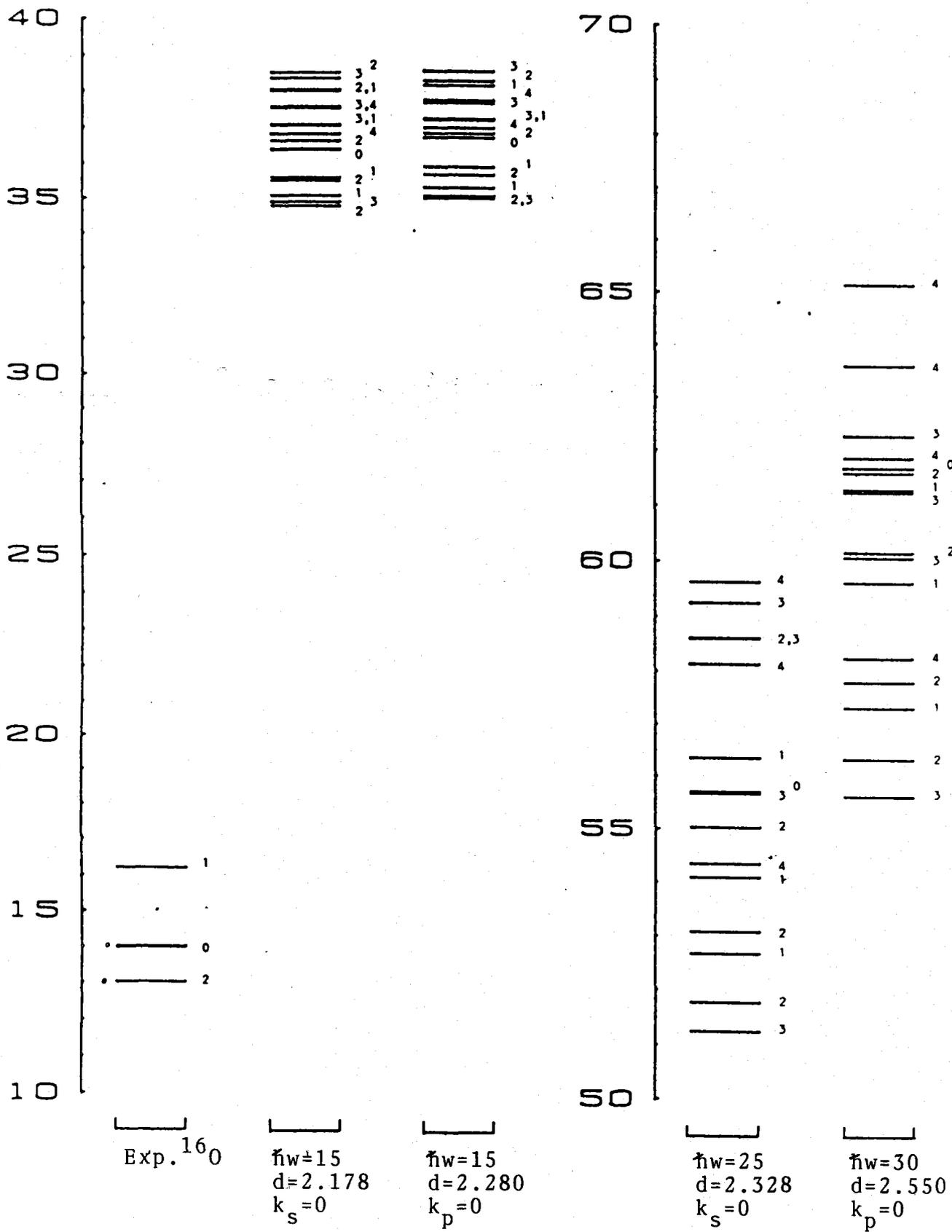


FIGURA 19

A=16 T=0  $\square = -$  CIY

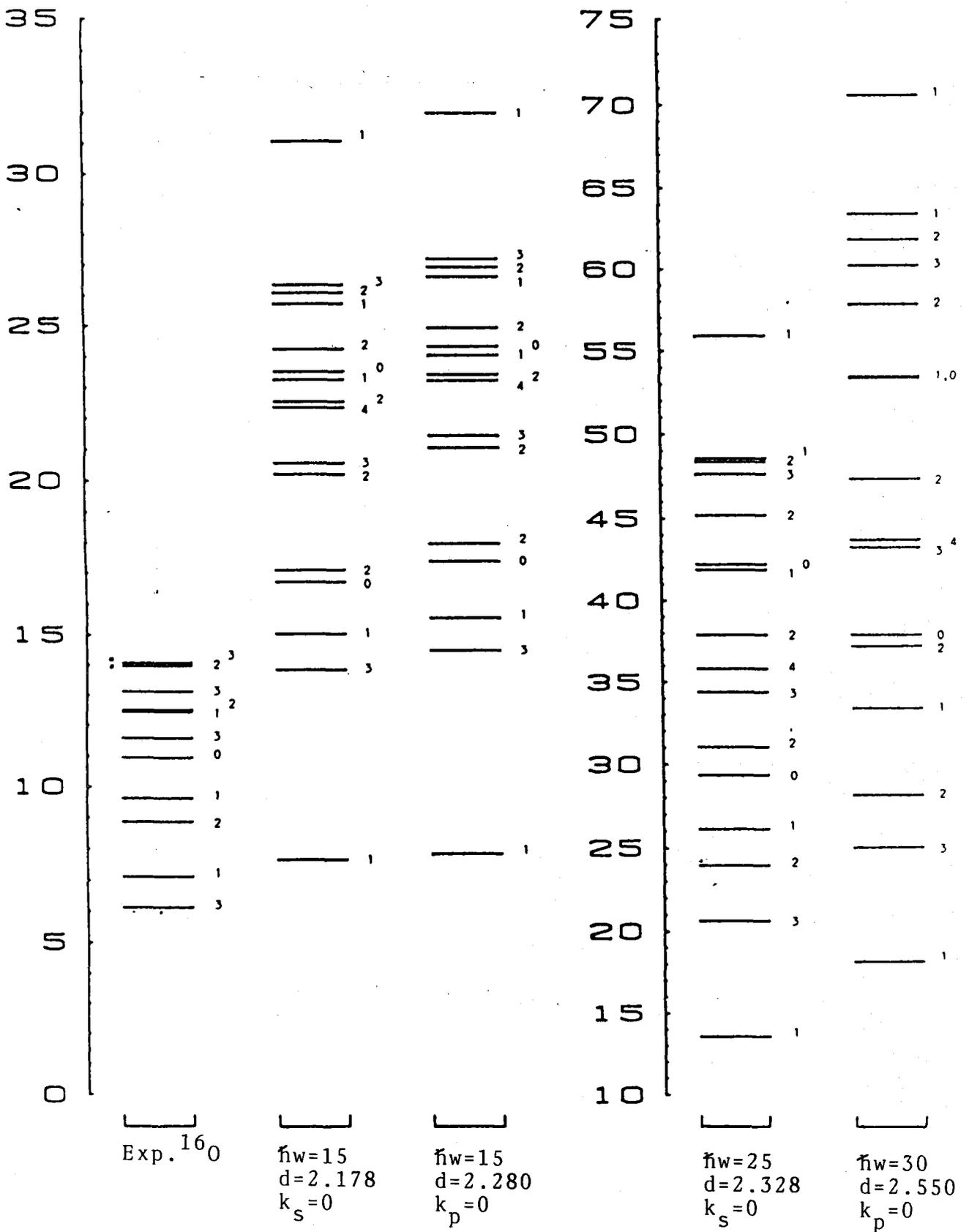


FIGURA 20

A=16 T=0  $\square = -$  FAHT

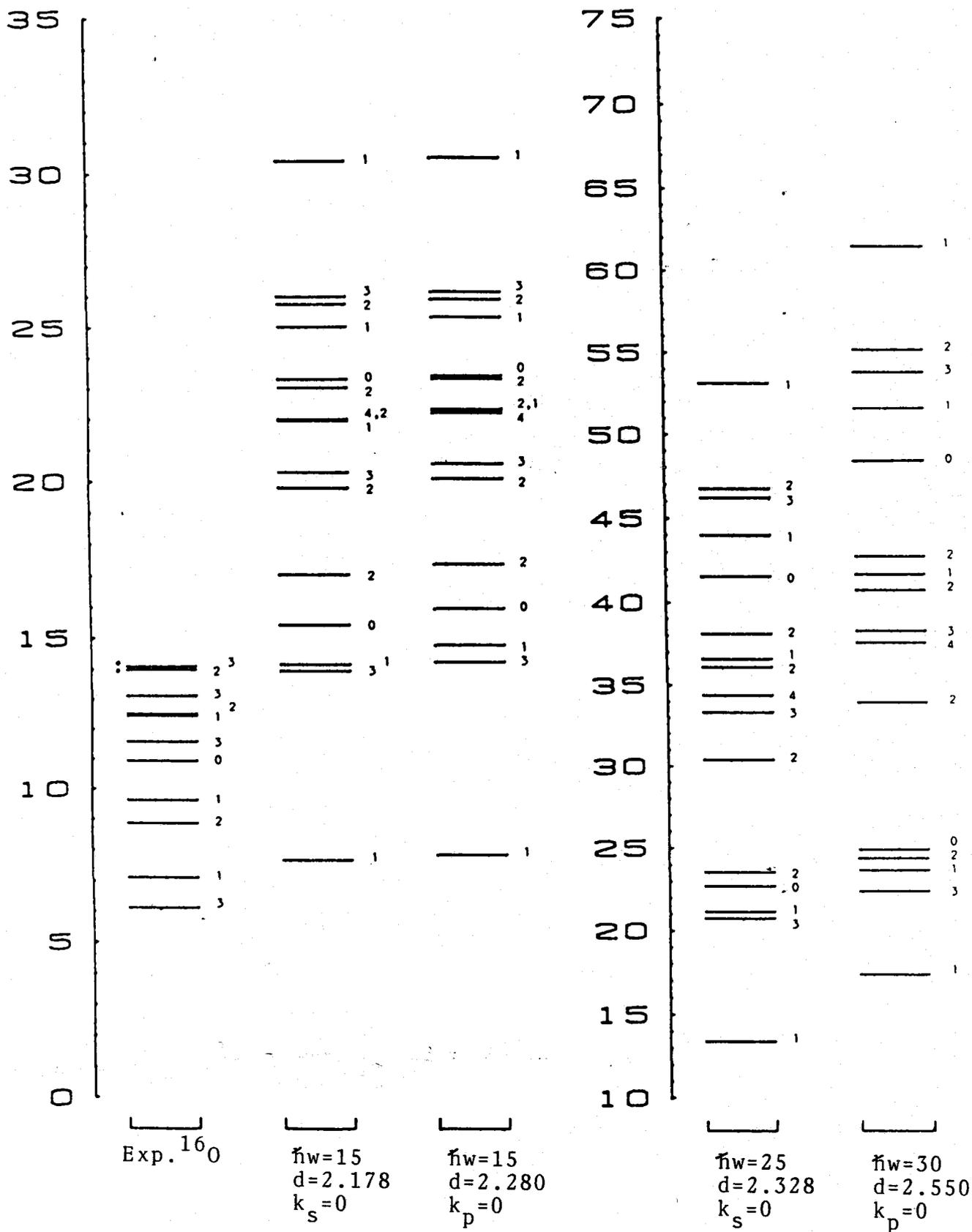


FIGURA 21

A=16 T=1  $\Gamma = -$  CIY

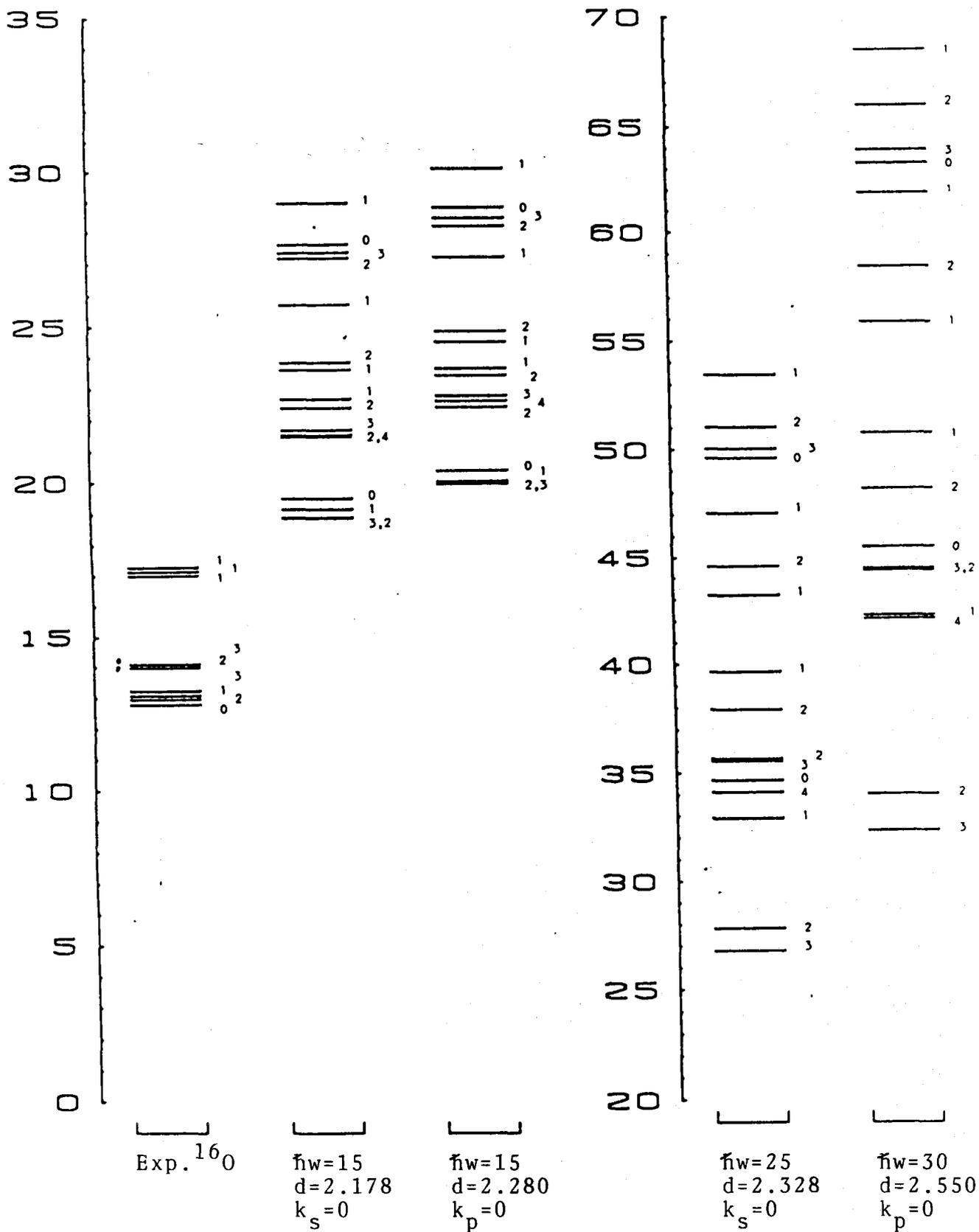


FIGURA 22

A=16 T=1  $\square = -$  FAHT

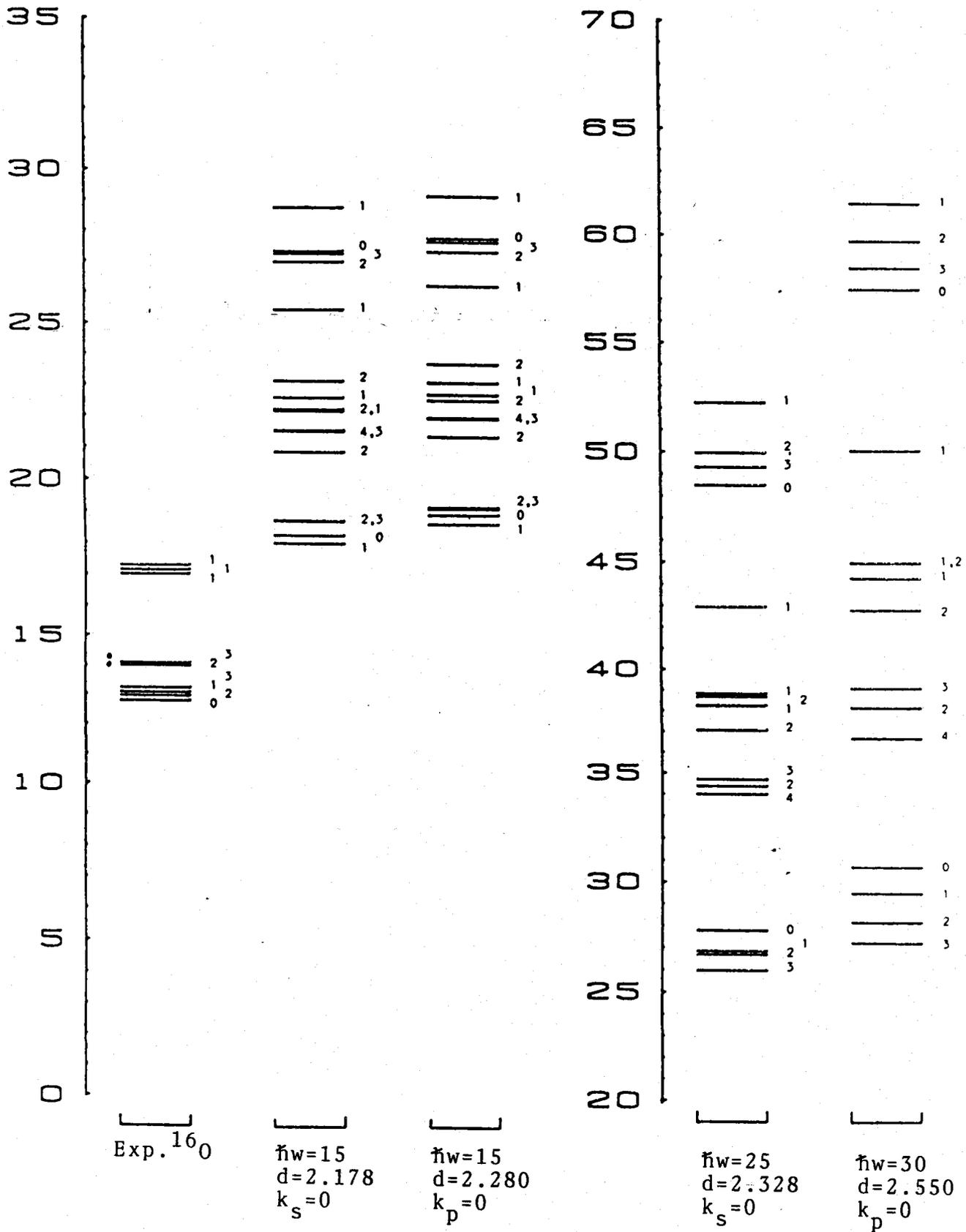


FIGURA 23

A=16 □=+

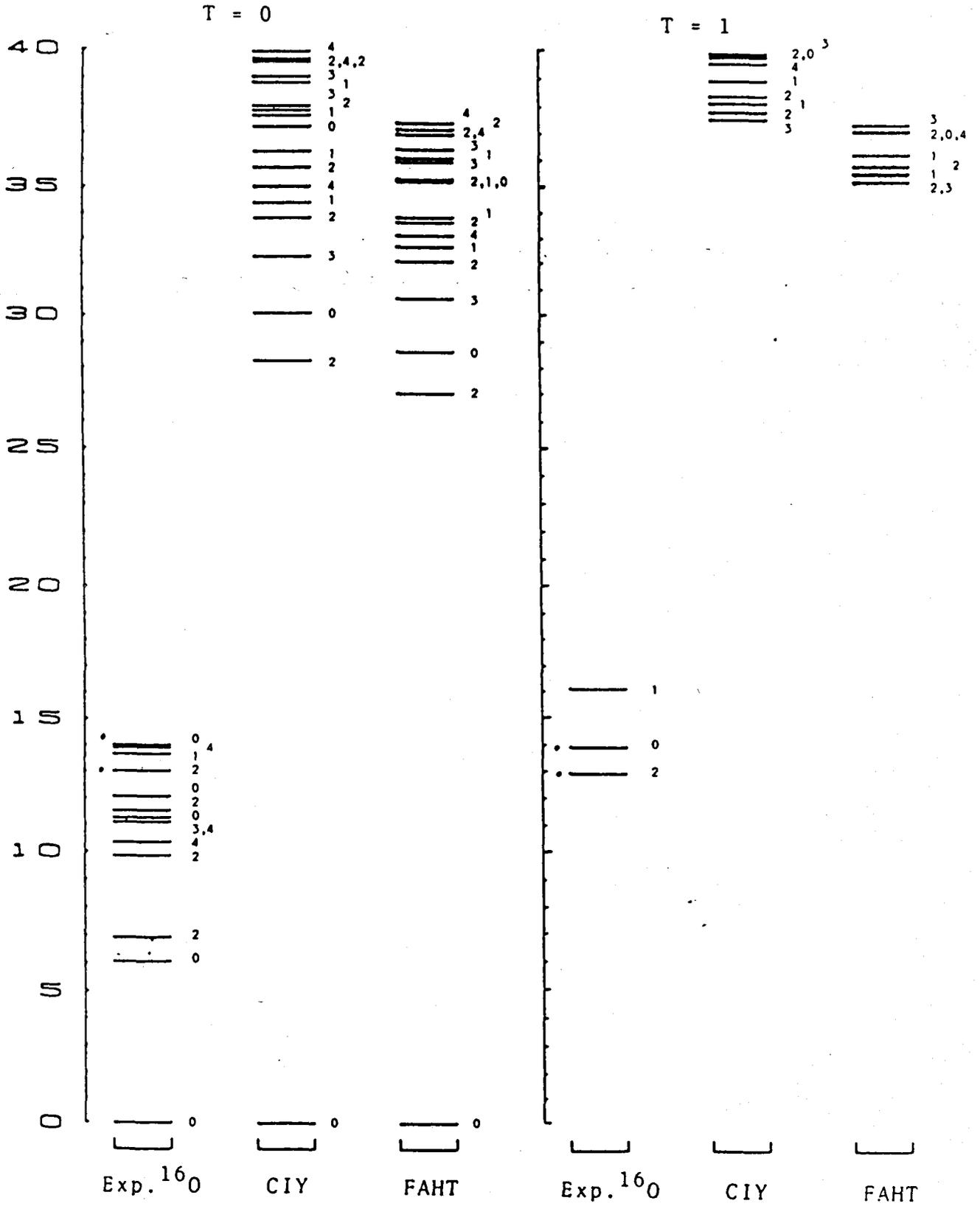


FIGURA 24

A=16 □ = -

T = 0

T = 1

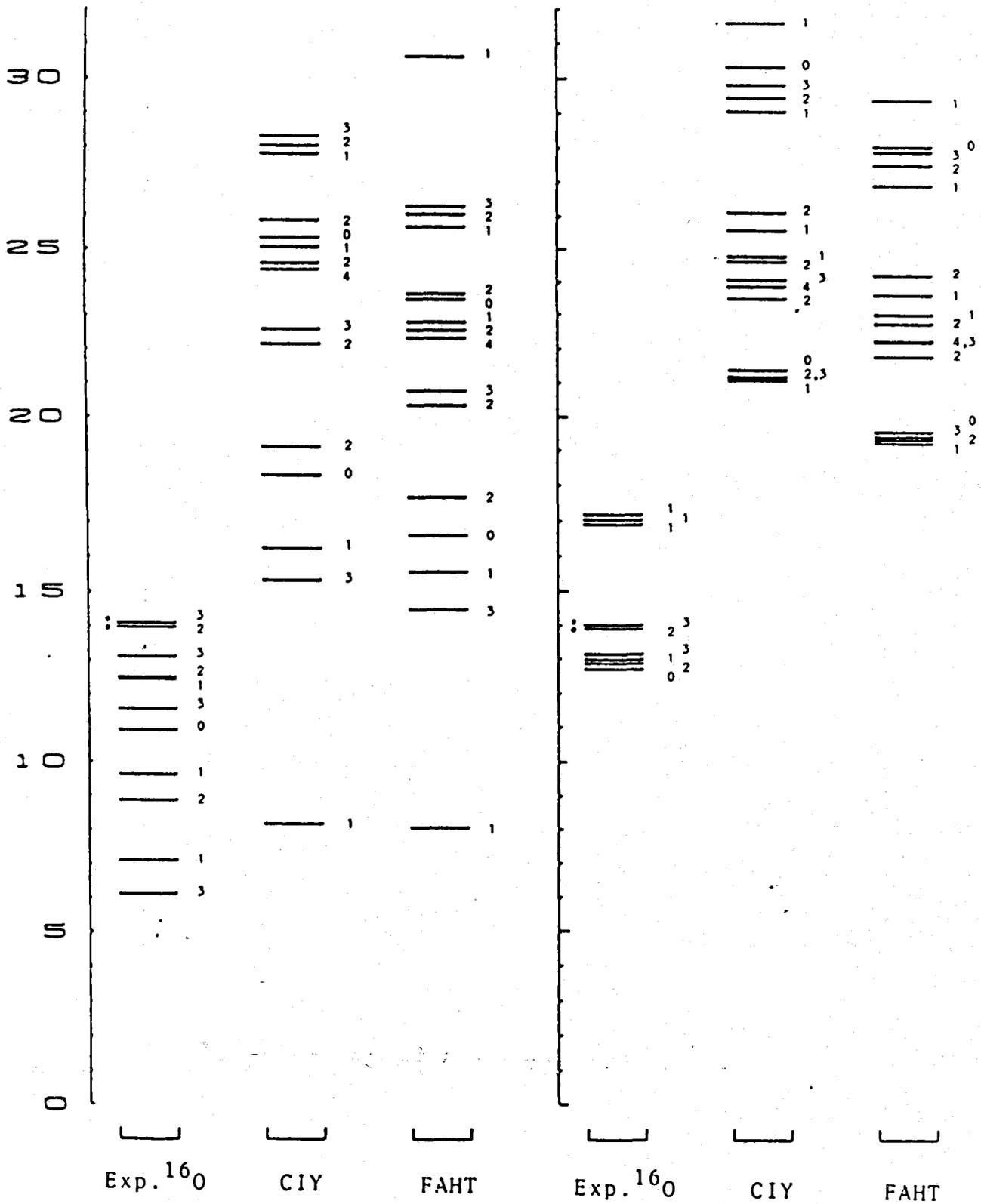


FIGURA 25

A=15 □ = -

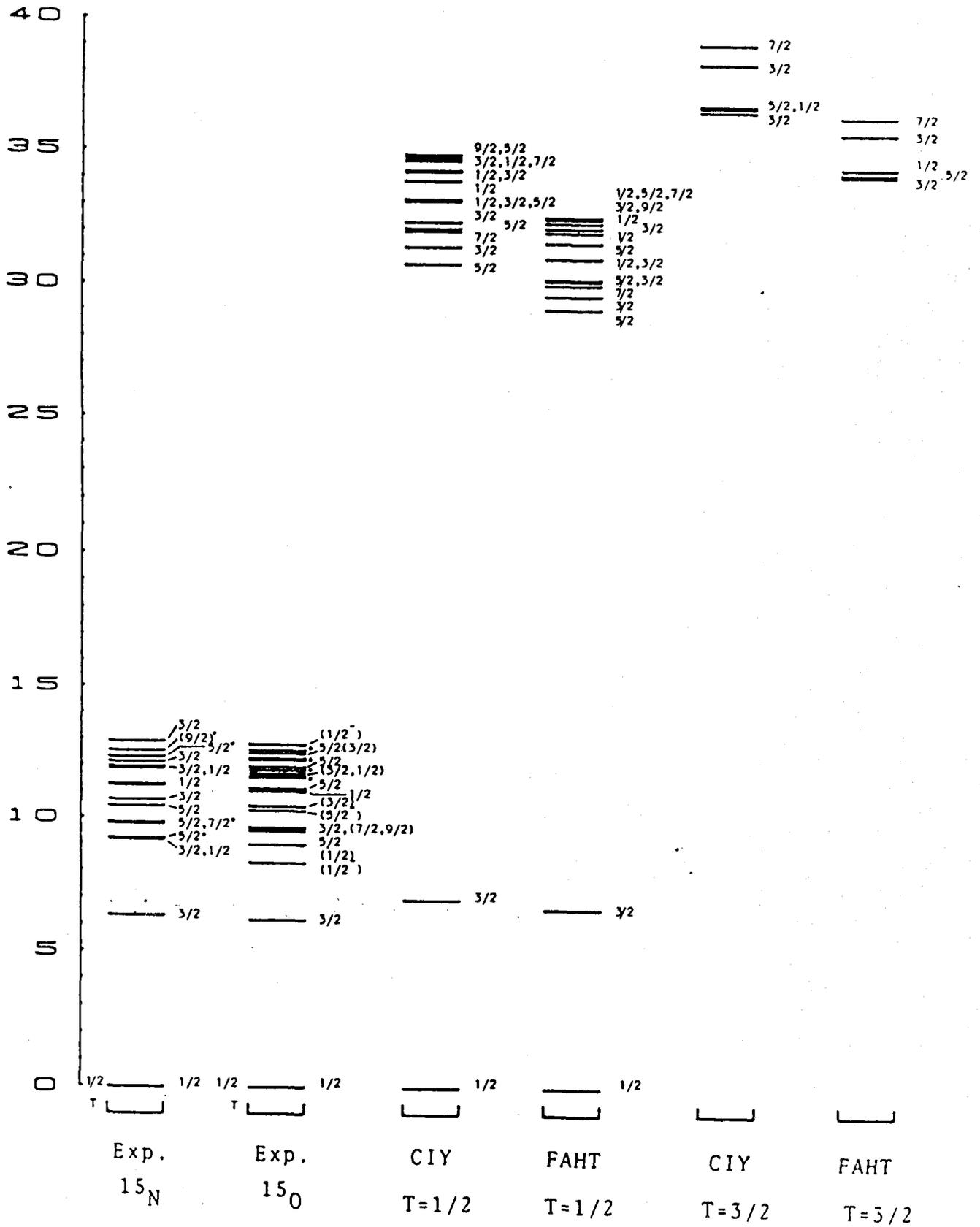


FIGURA 26

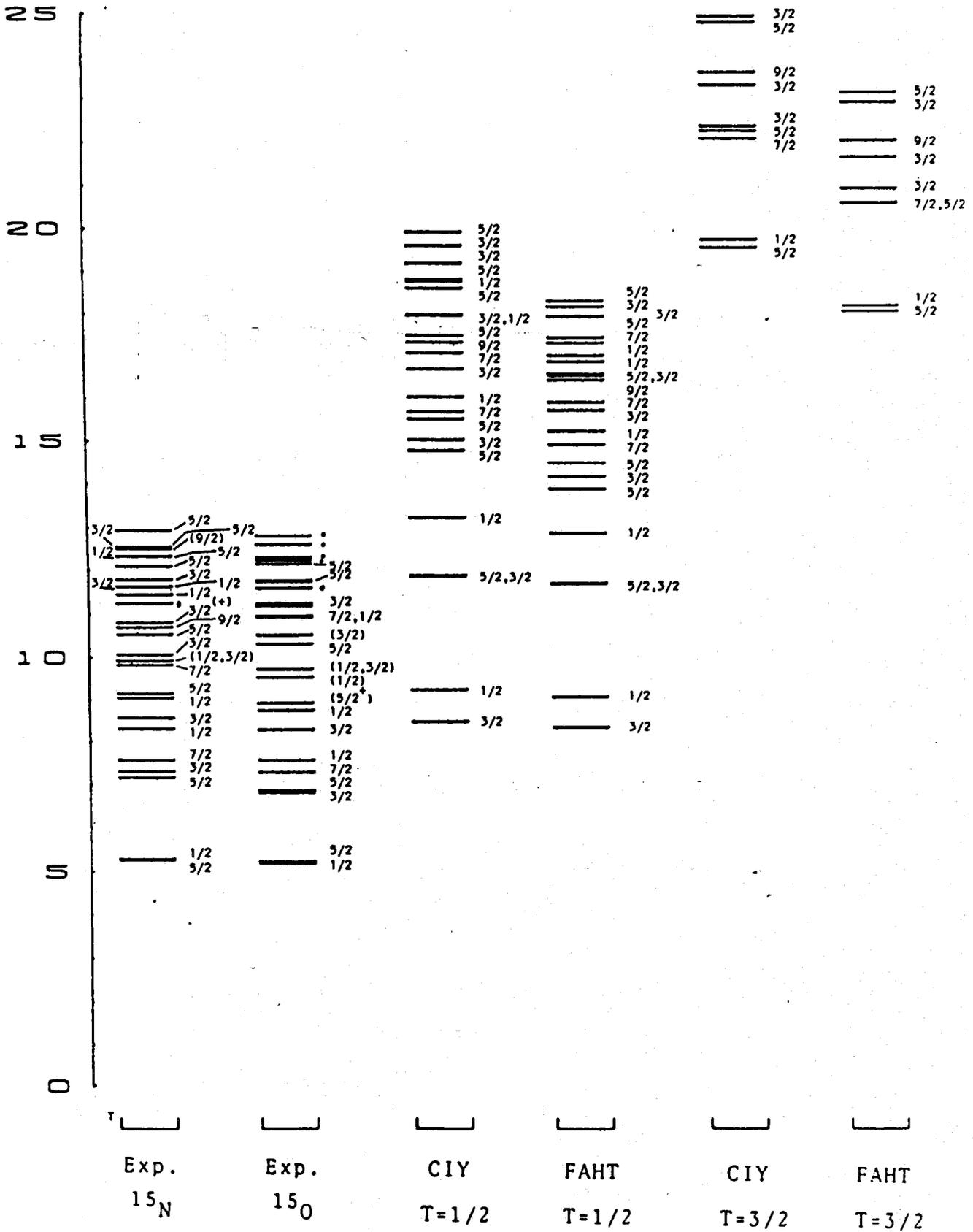


FIGURA 27

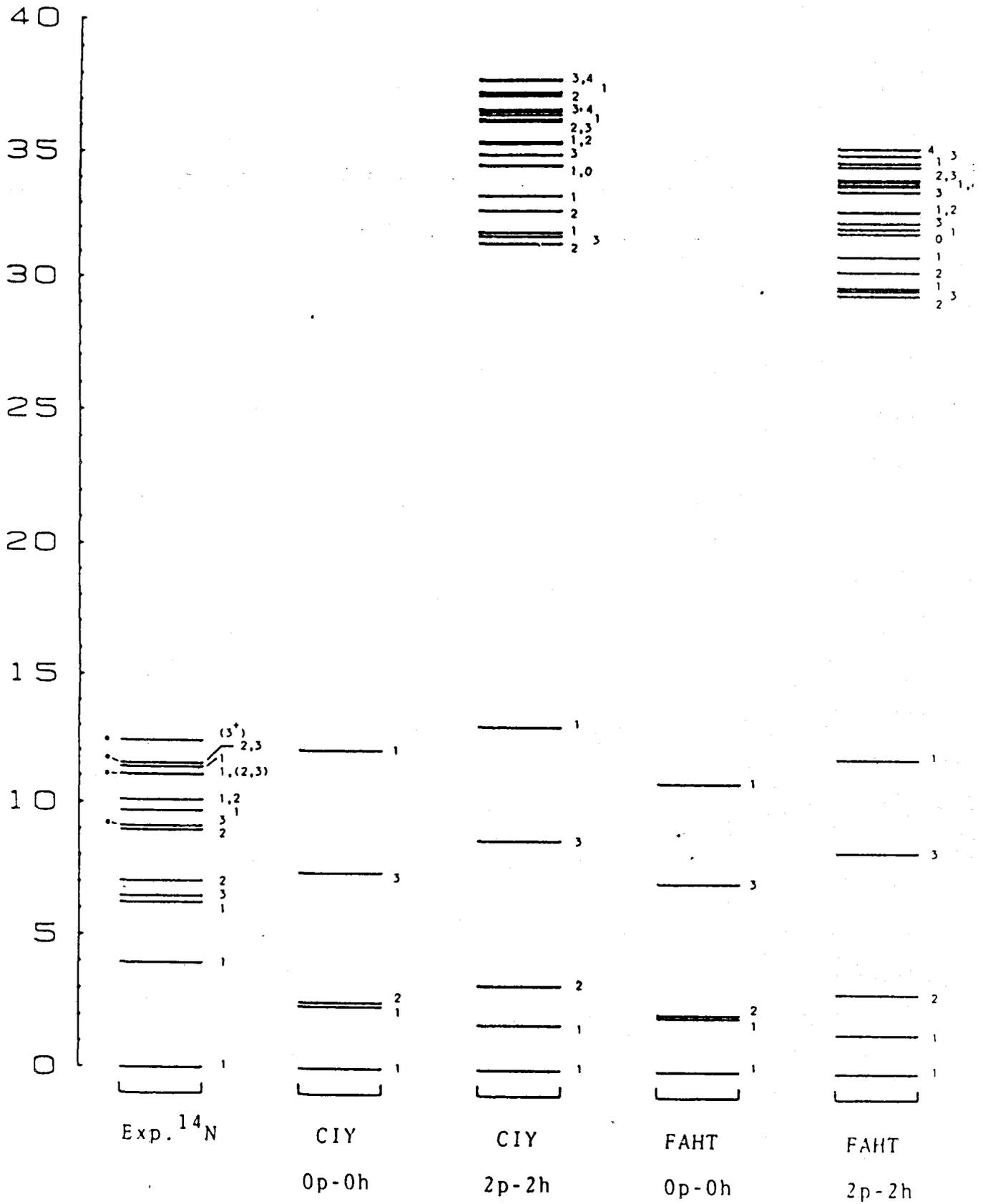


FIGURA 28

A=14  $\square = +$  T=1

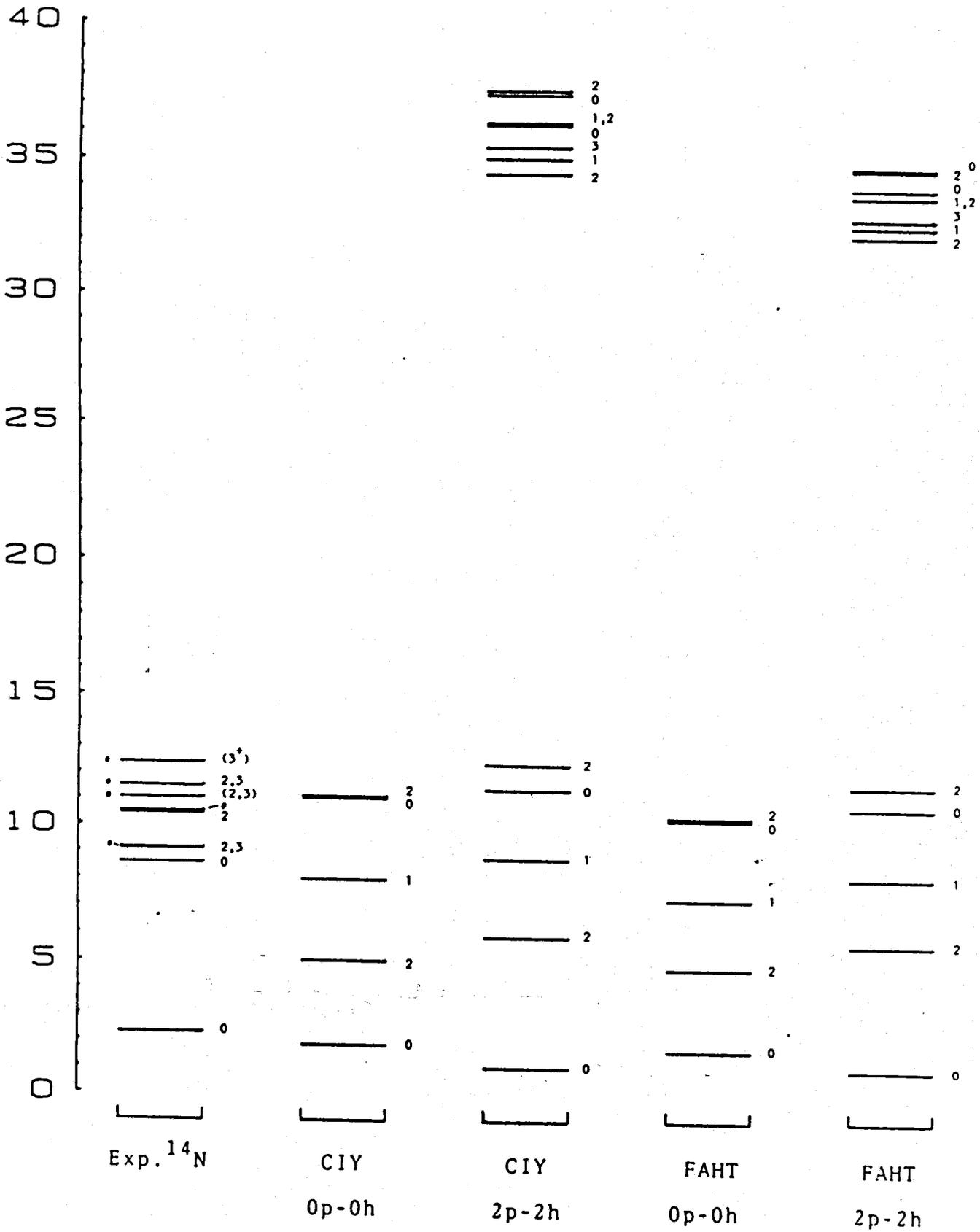


FIGURA 29

A=14  $\square = -$

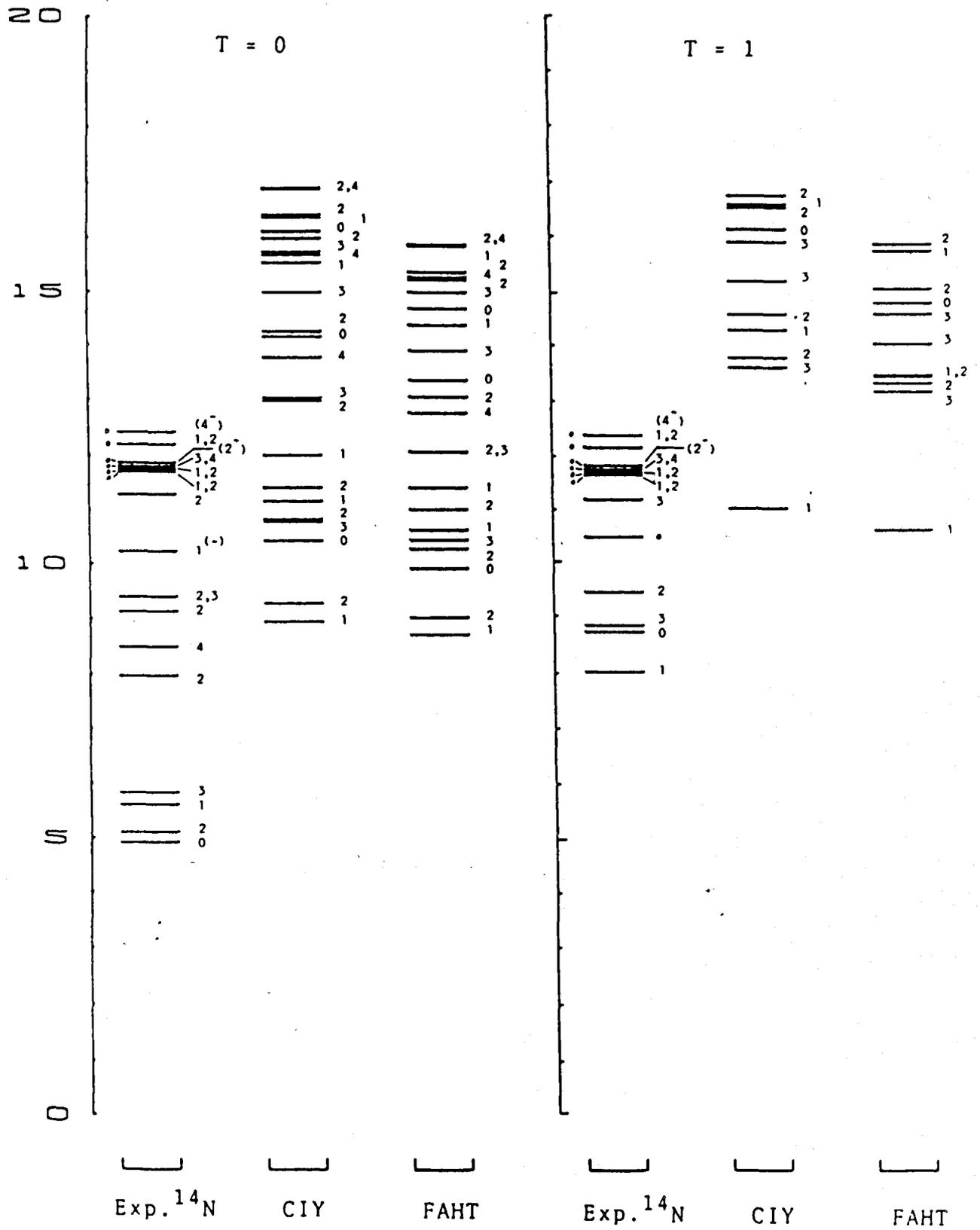
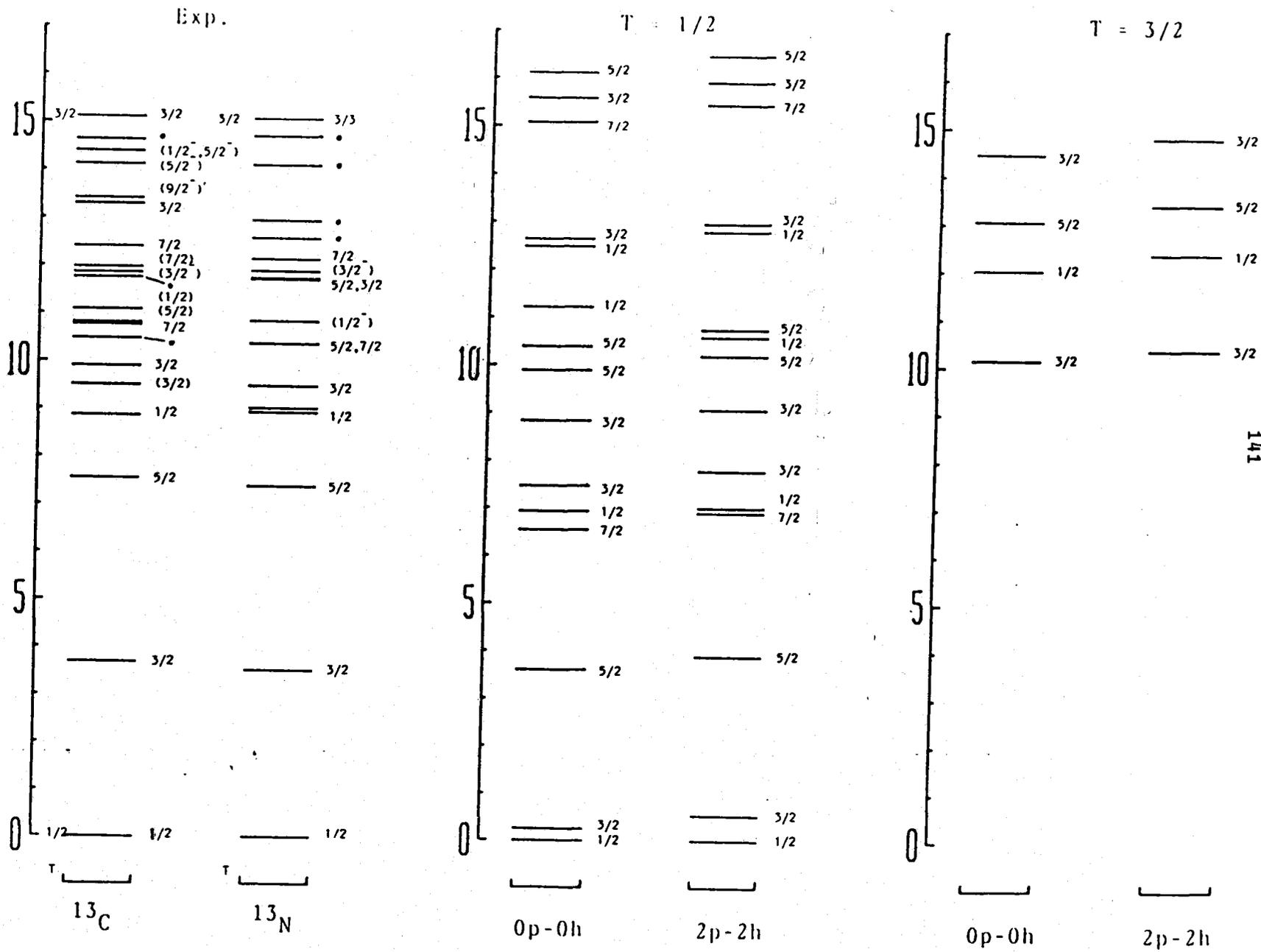


FIGURA 30

FIGURA 31

A=13  $\Gamma = -$  C1Y



A=13  $\Gamma = -$  FAHT

FIGURA 32

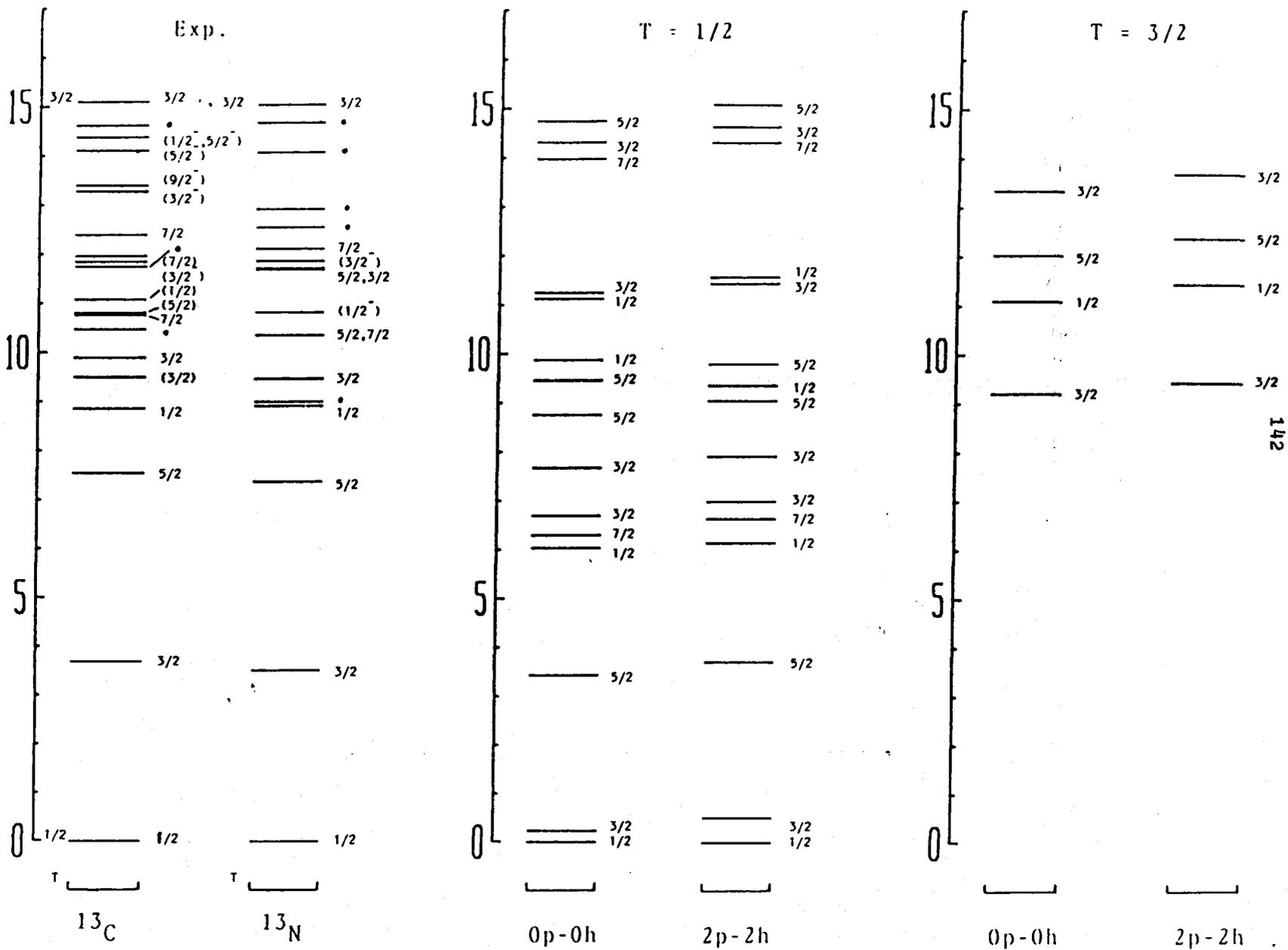
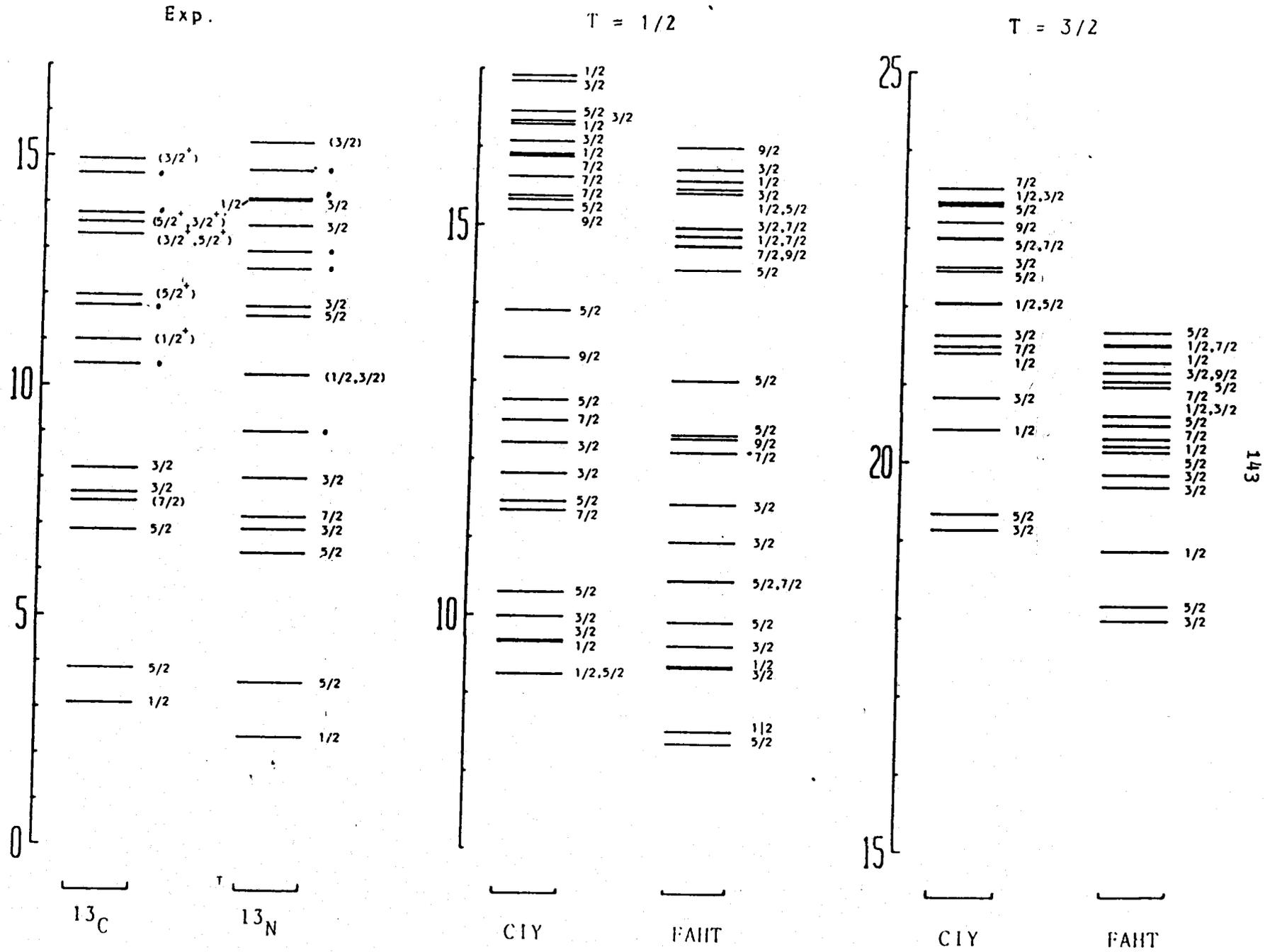


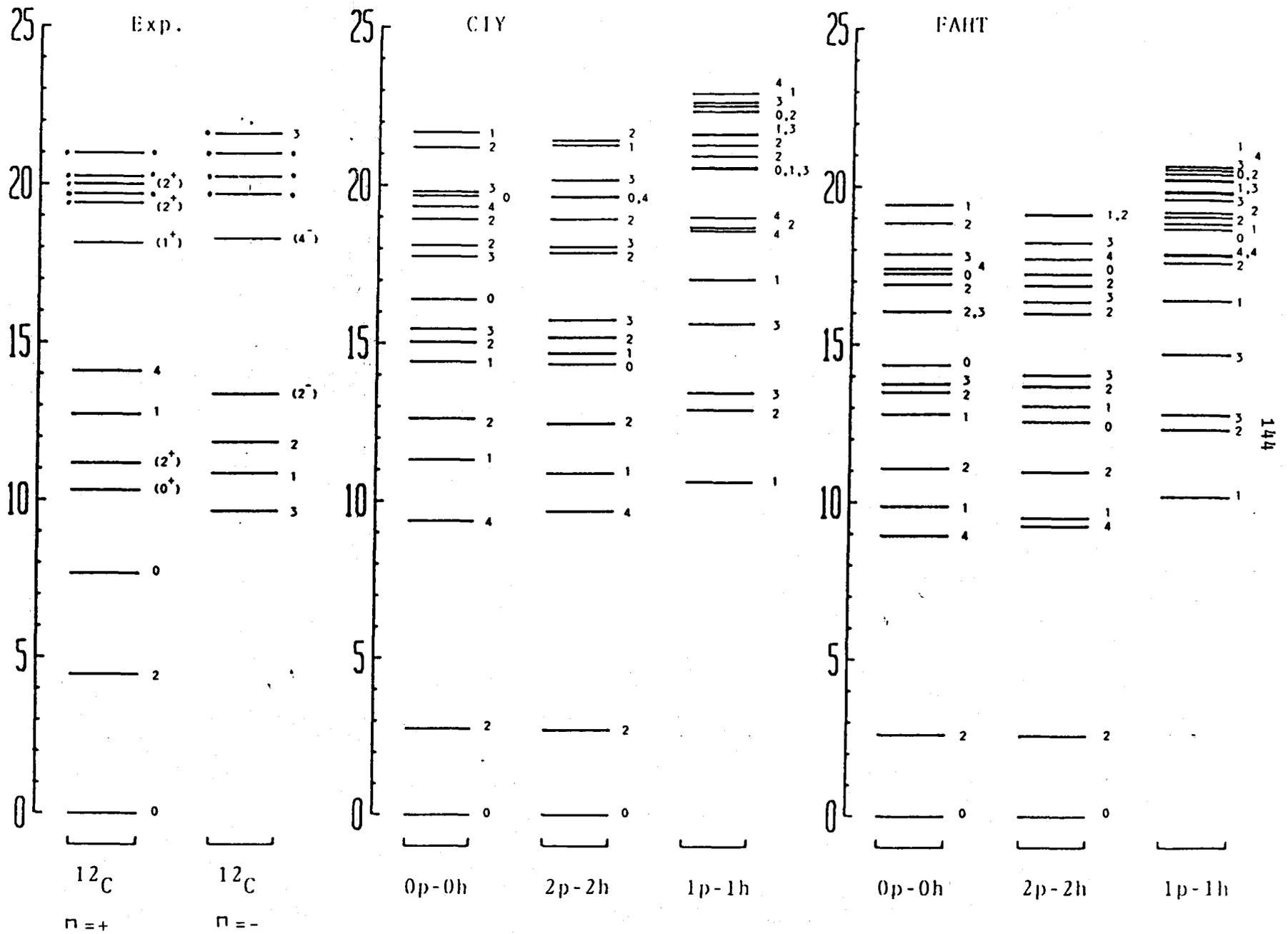
FIGURA 33

A=13  $\square=+$



A=12 T=0

FIGURA 34



A=12 T=1

FIGURA 35

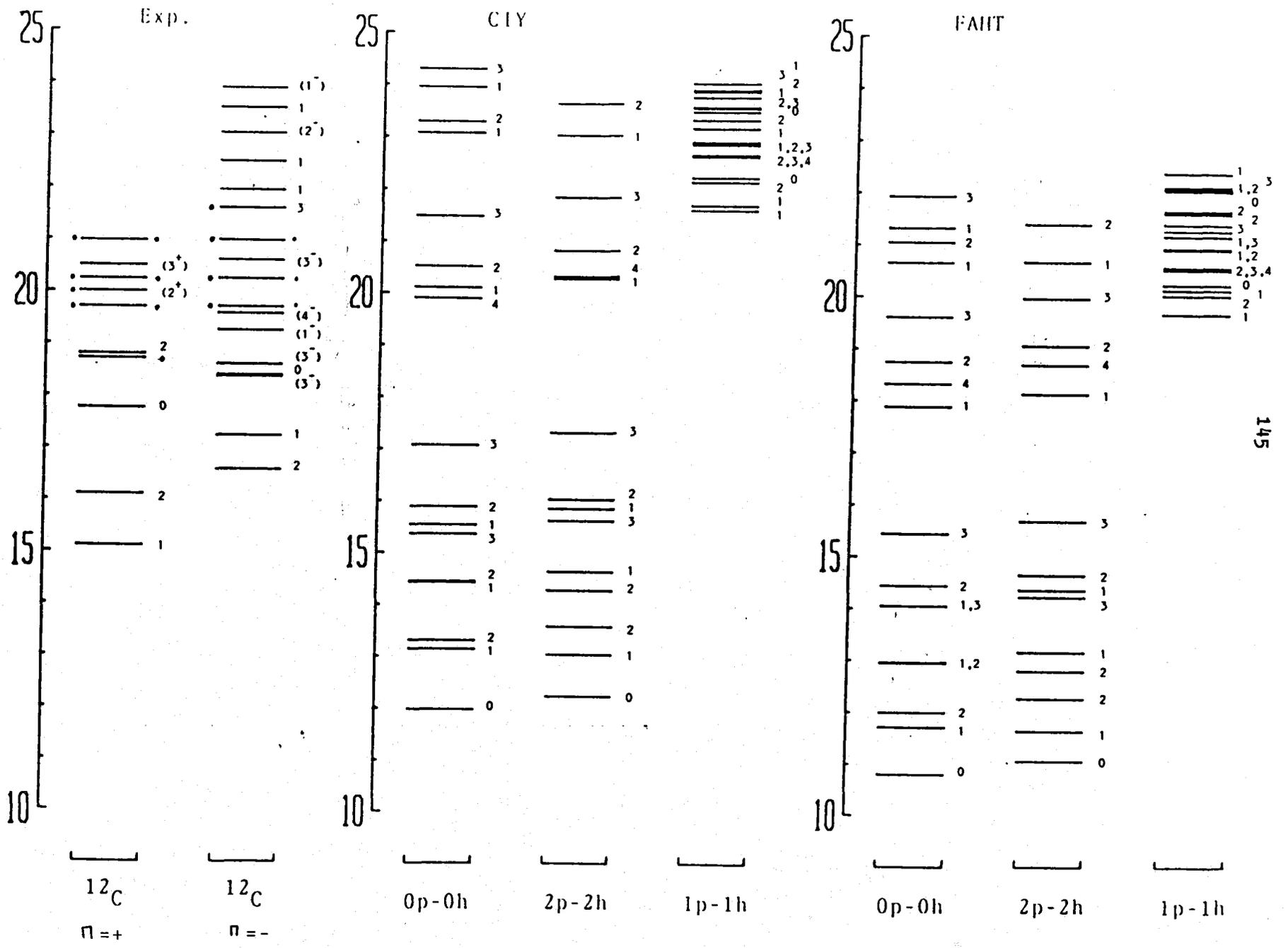
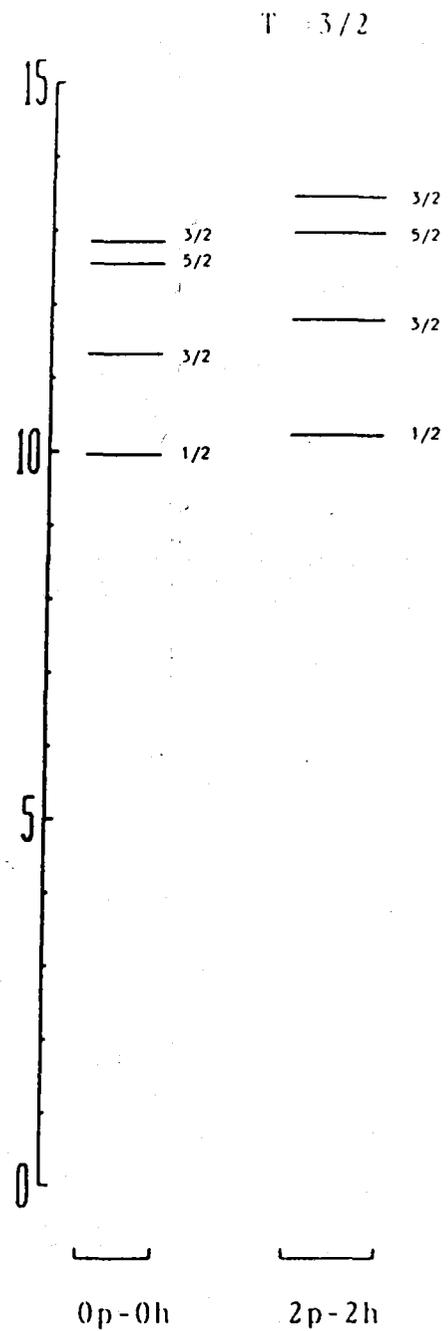
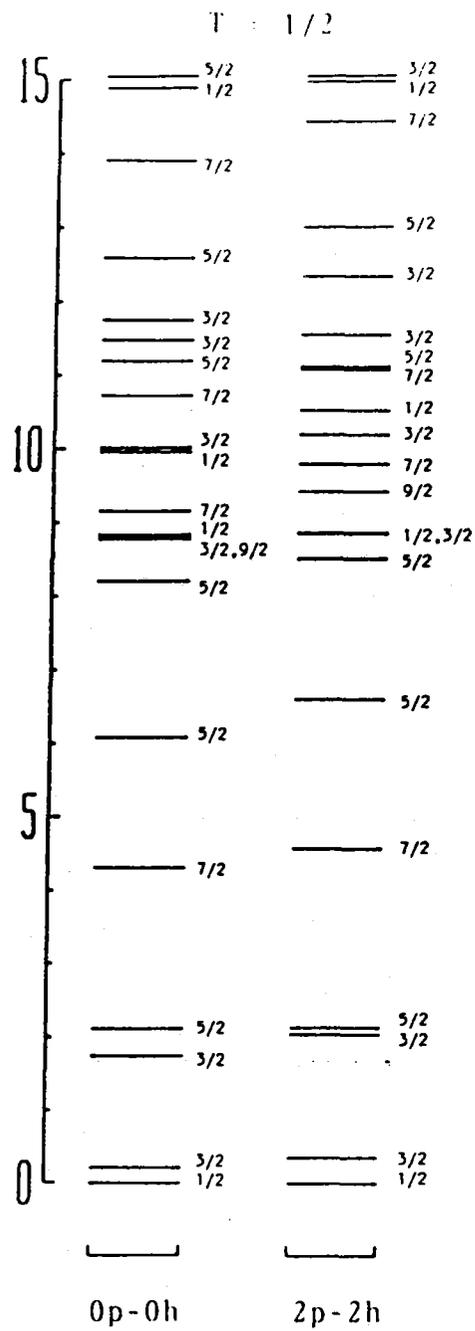
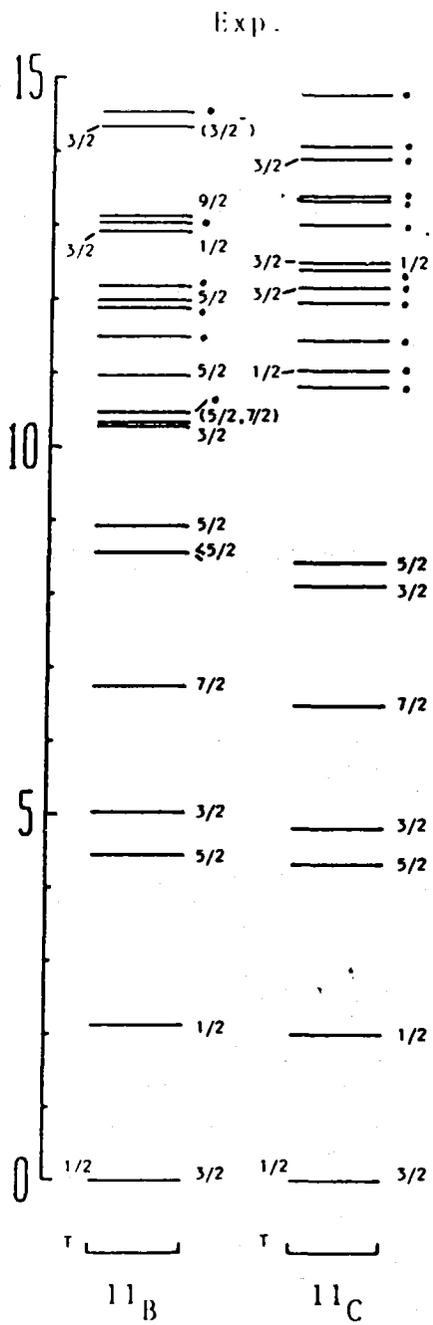


FIGURA 36

A=11 N=- CIV

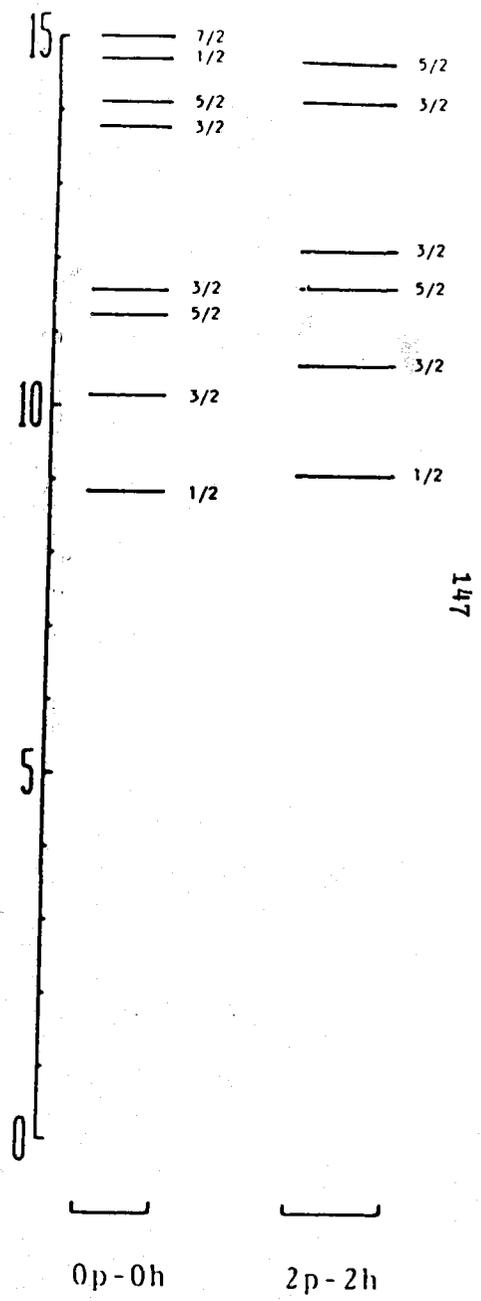
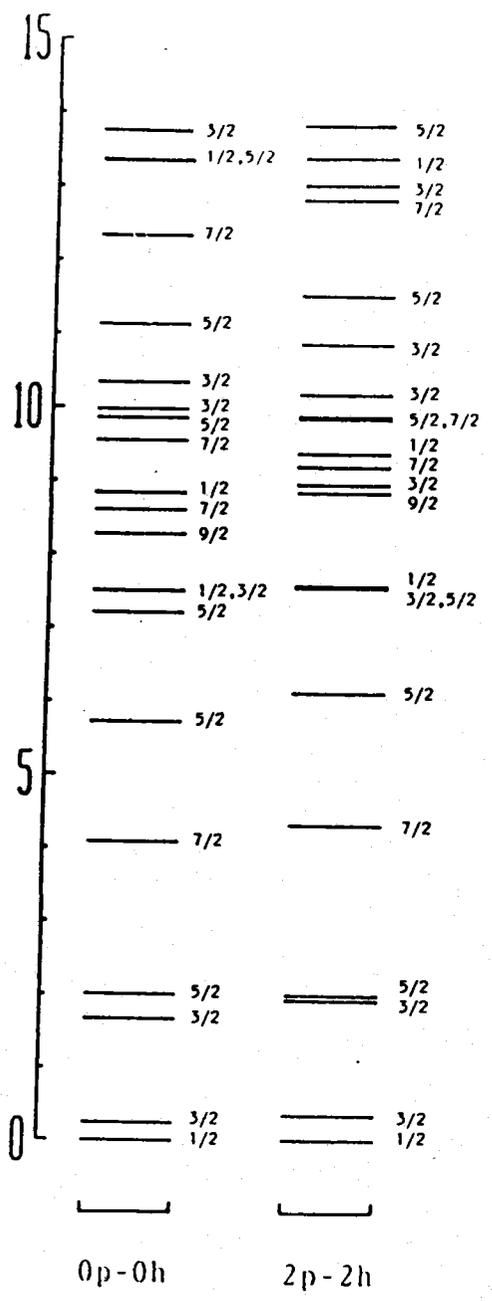
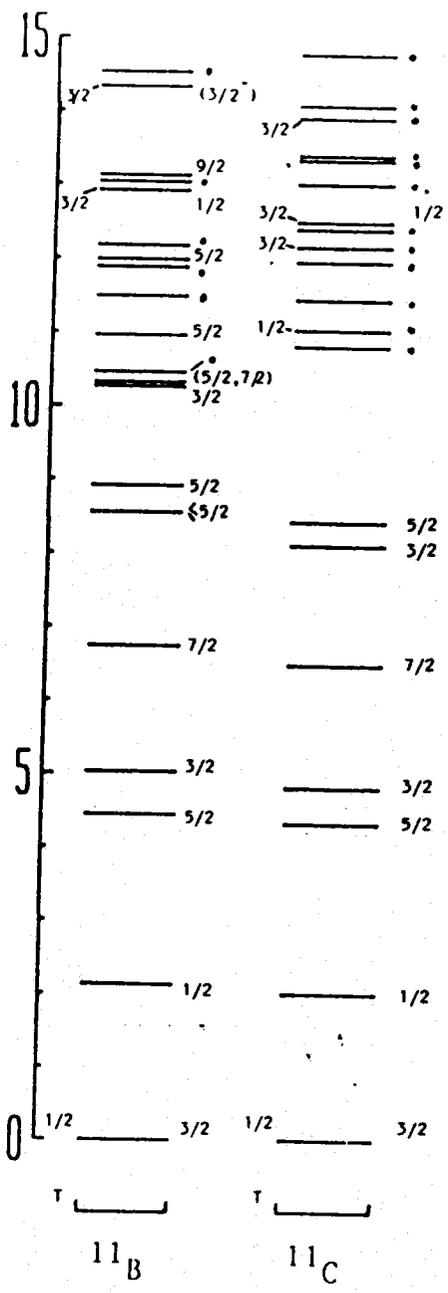


EXP.

T 1/2

T = 3/2

A=11 N=- FAHT

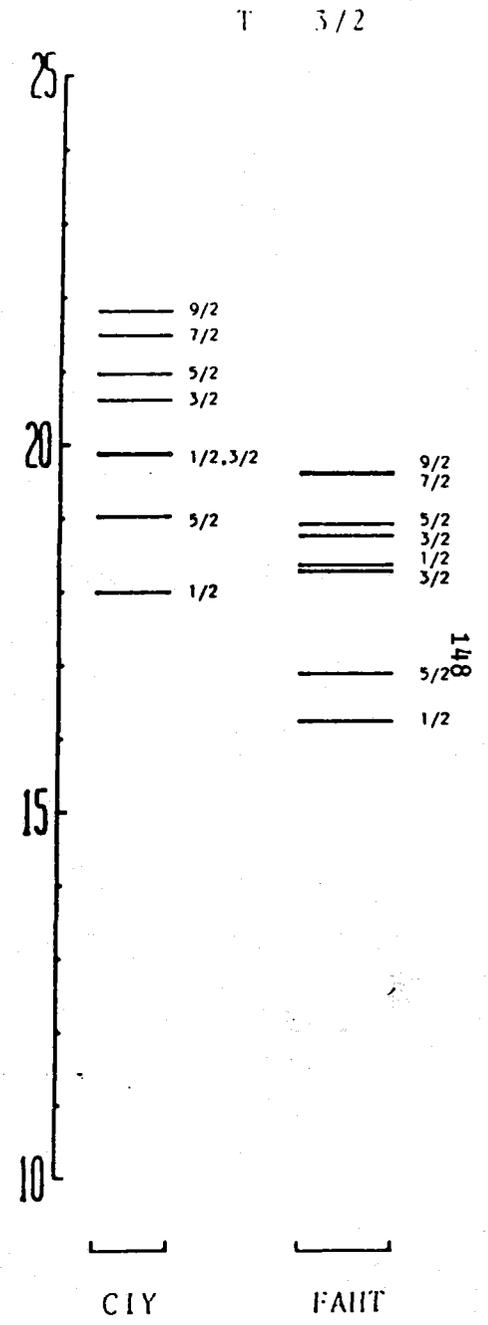
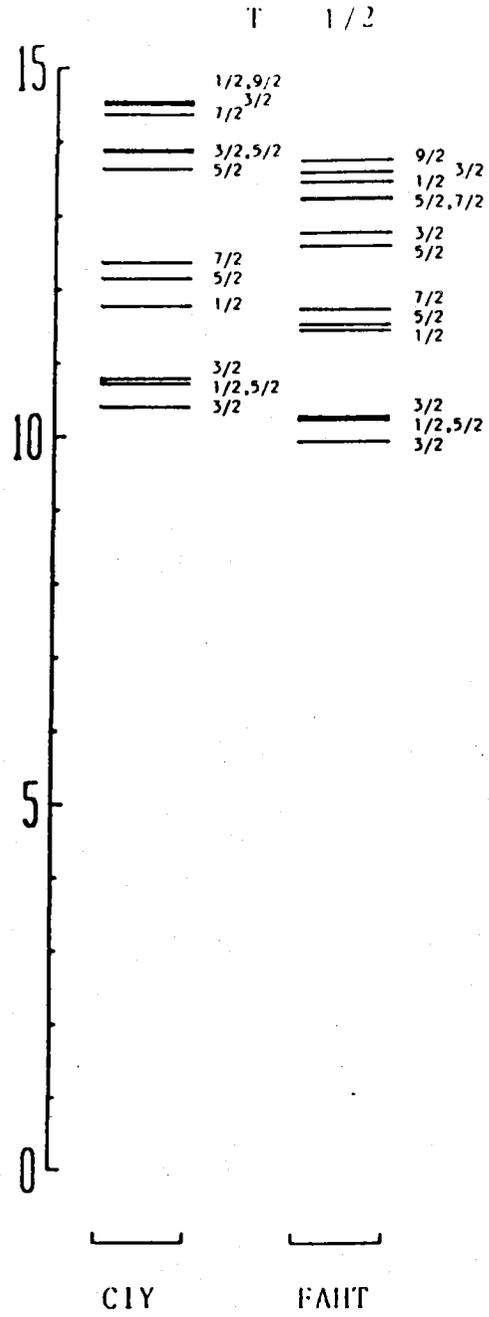
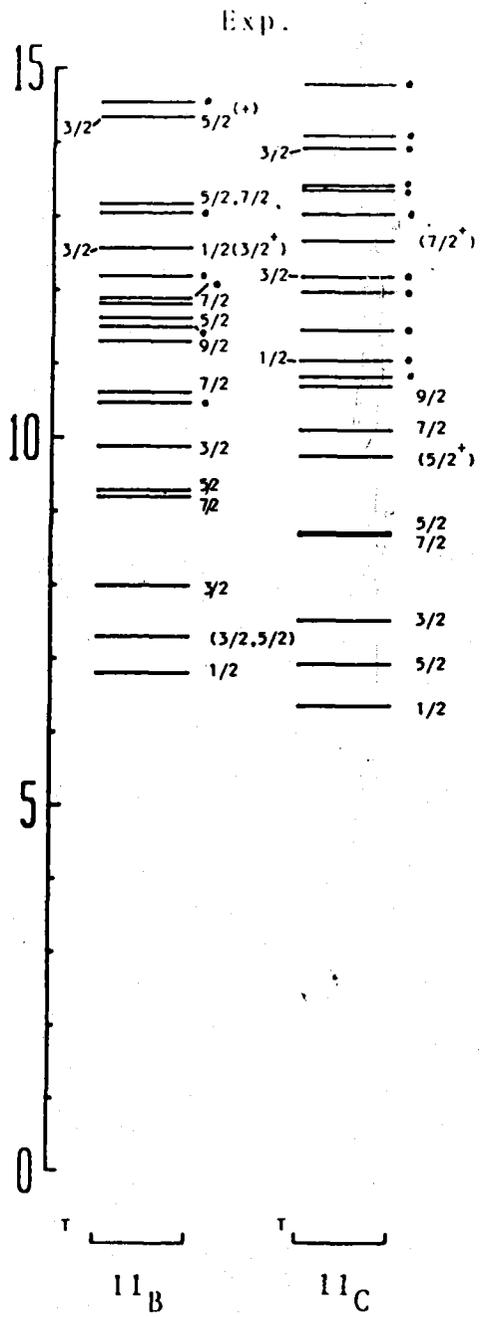


147

FIGURA 37

FIGURA 38

A=11  $\Gamma=+$



EXP.

CITY

FAHIF

A=10 T=0

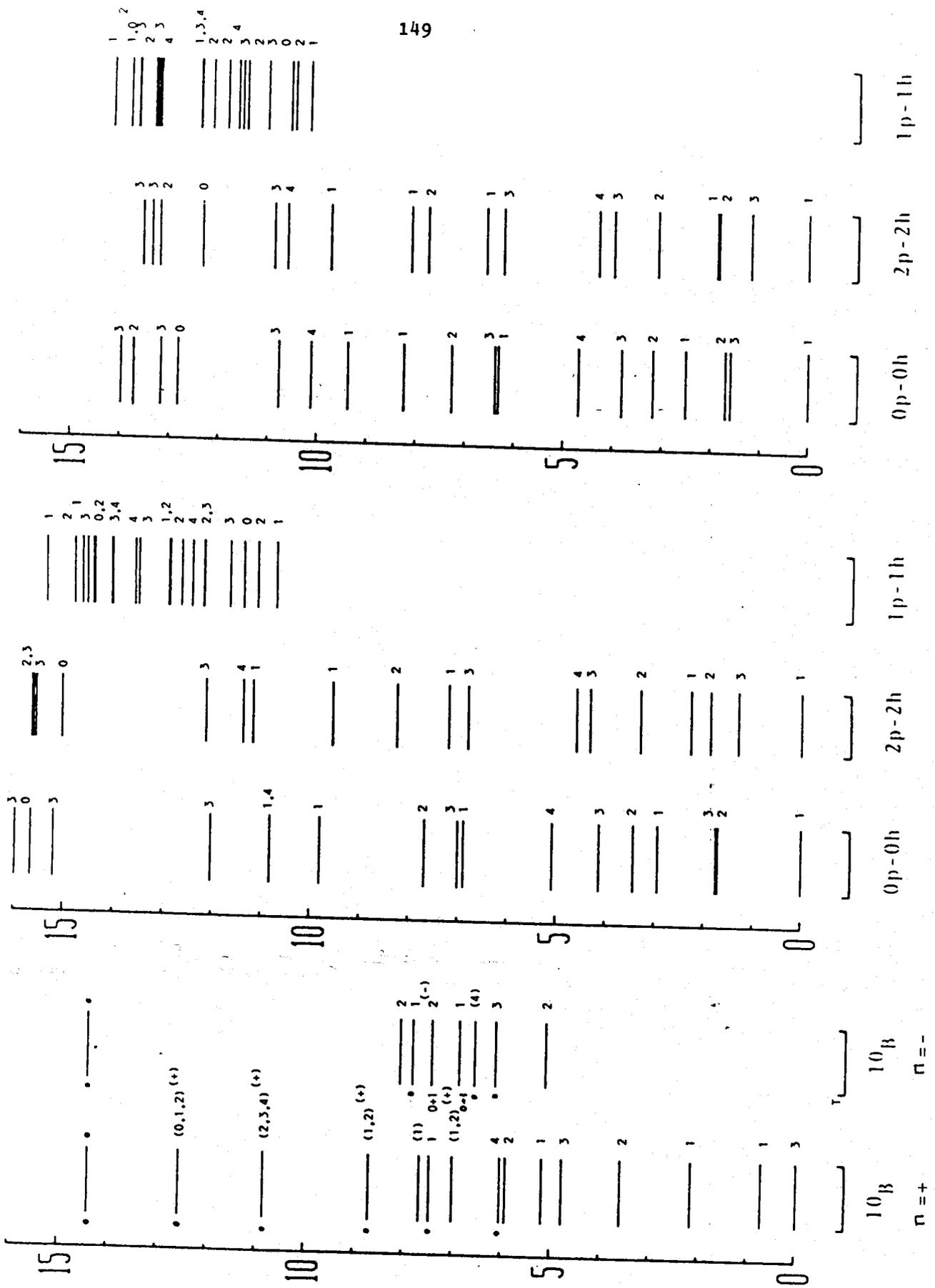
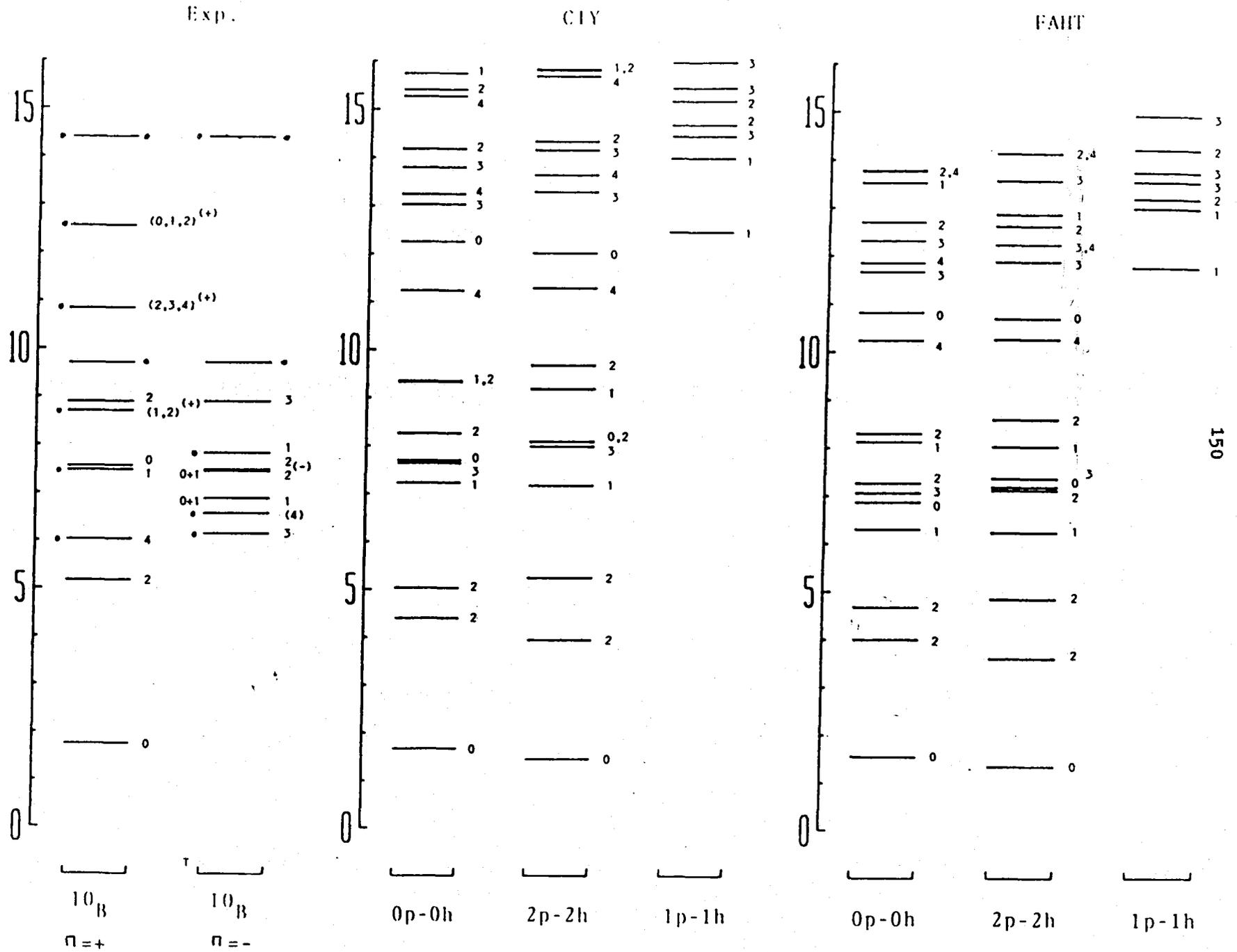


FIGURA 39

FIGURA 40

A=10  
T=1



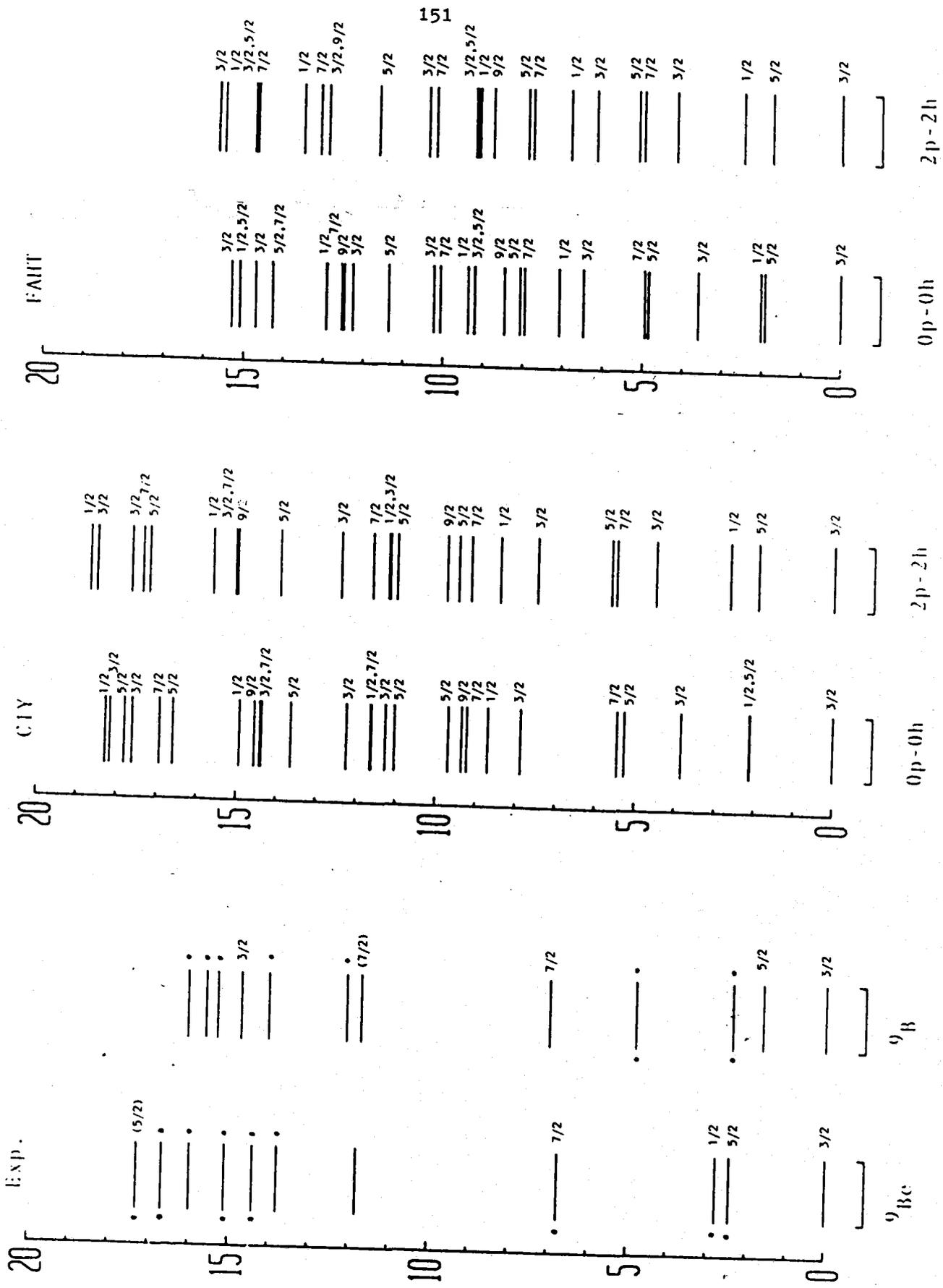
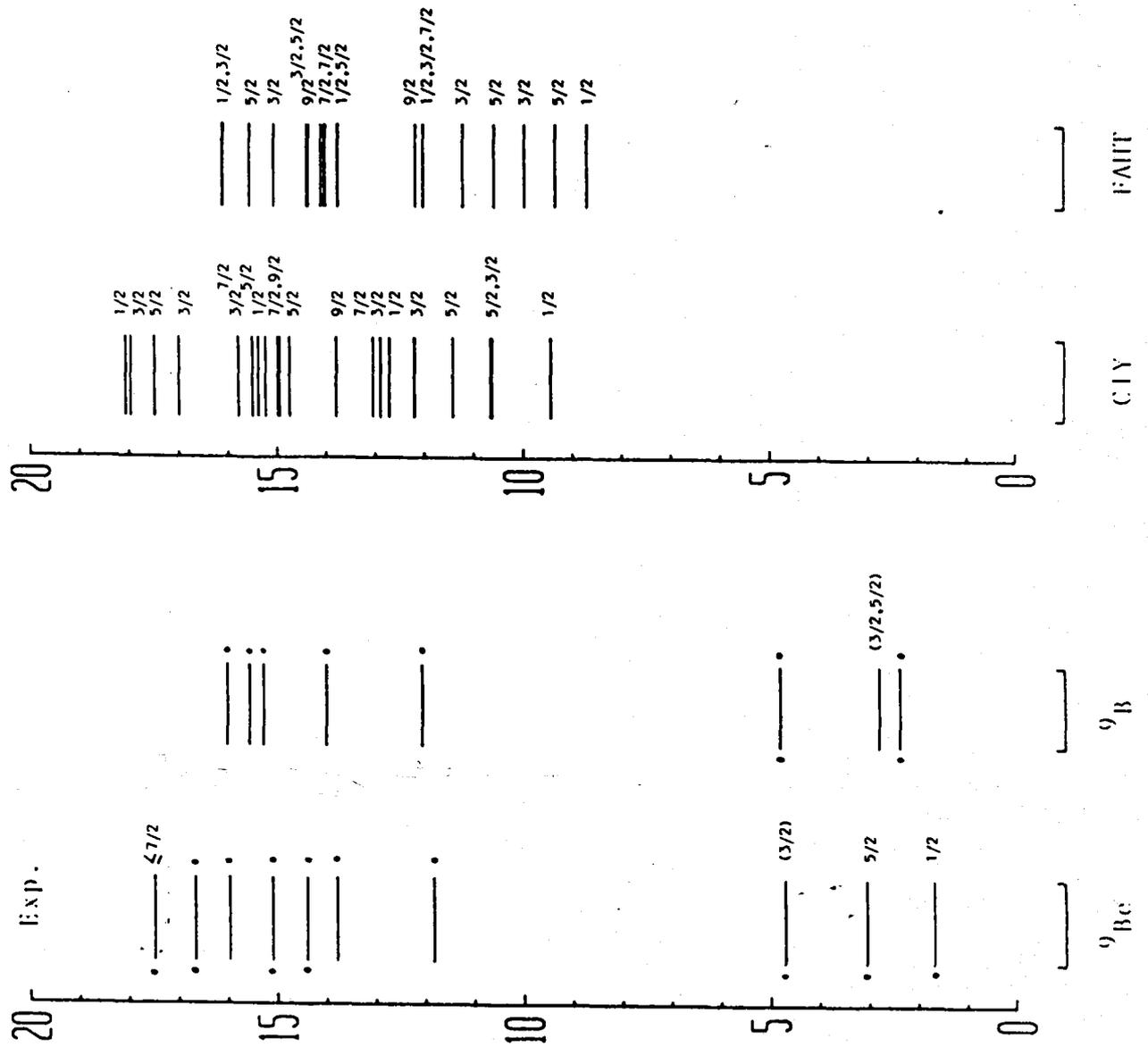


FIGURA 41



A=9 T=1/2  $\square = +$

FIGURA 42

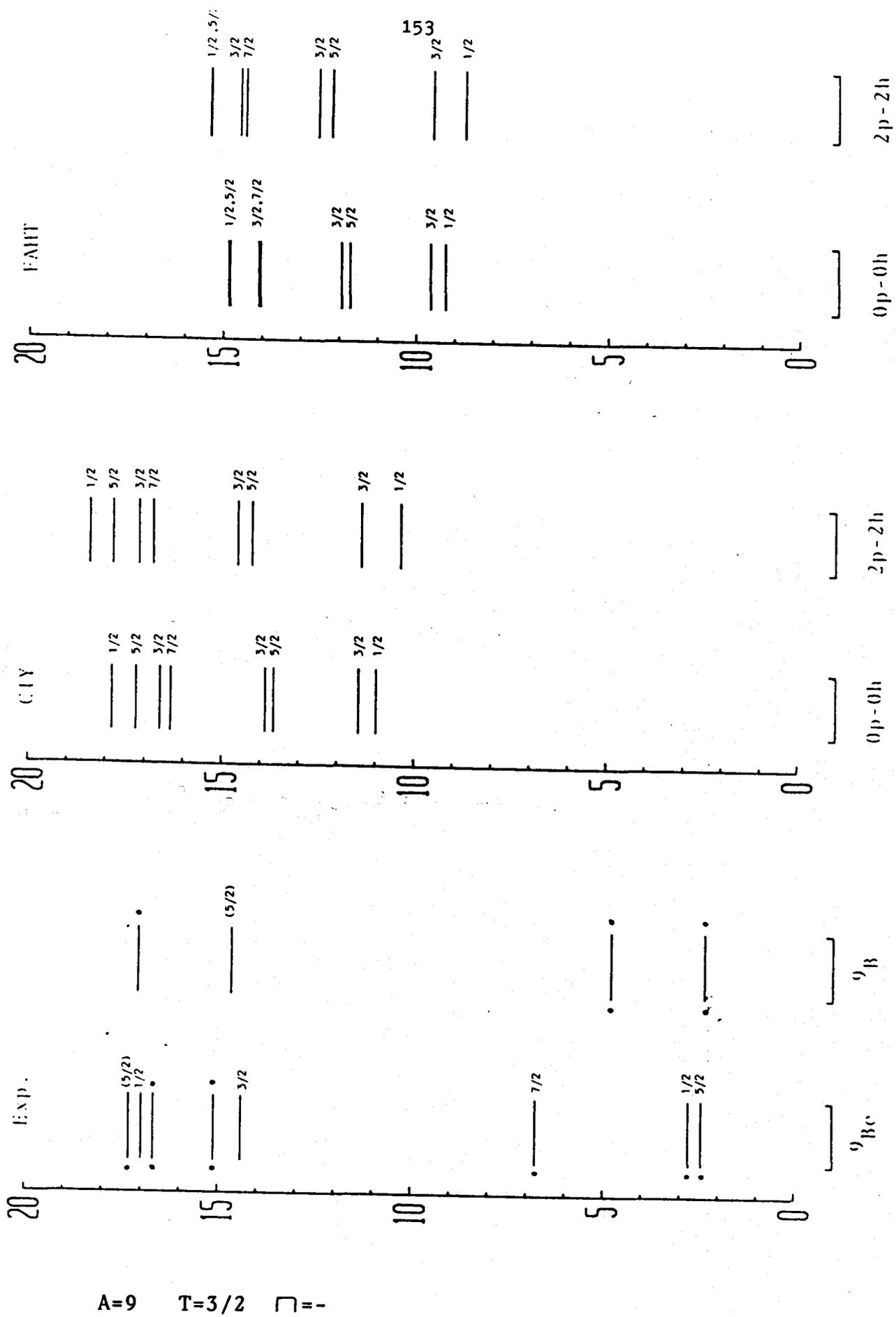


FIGURA 43

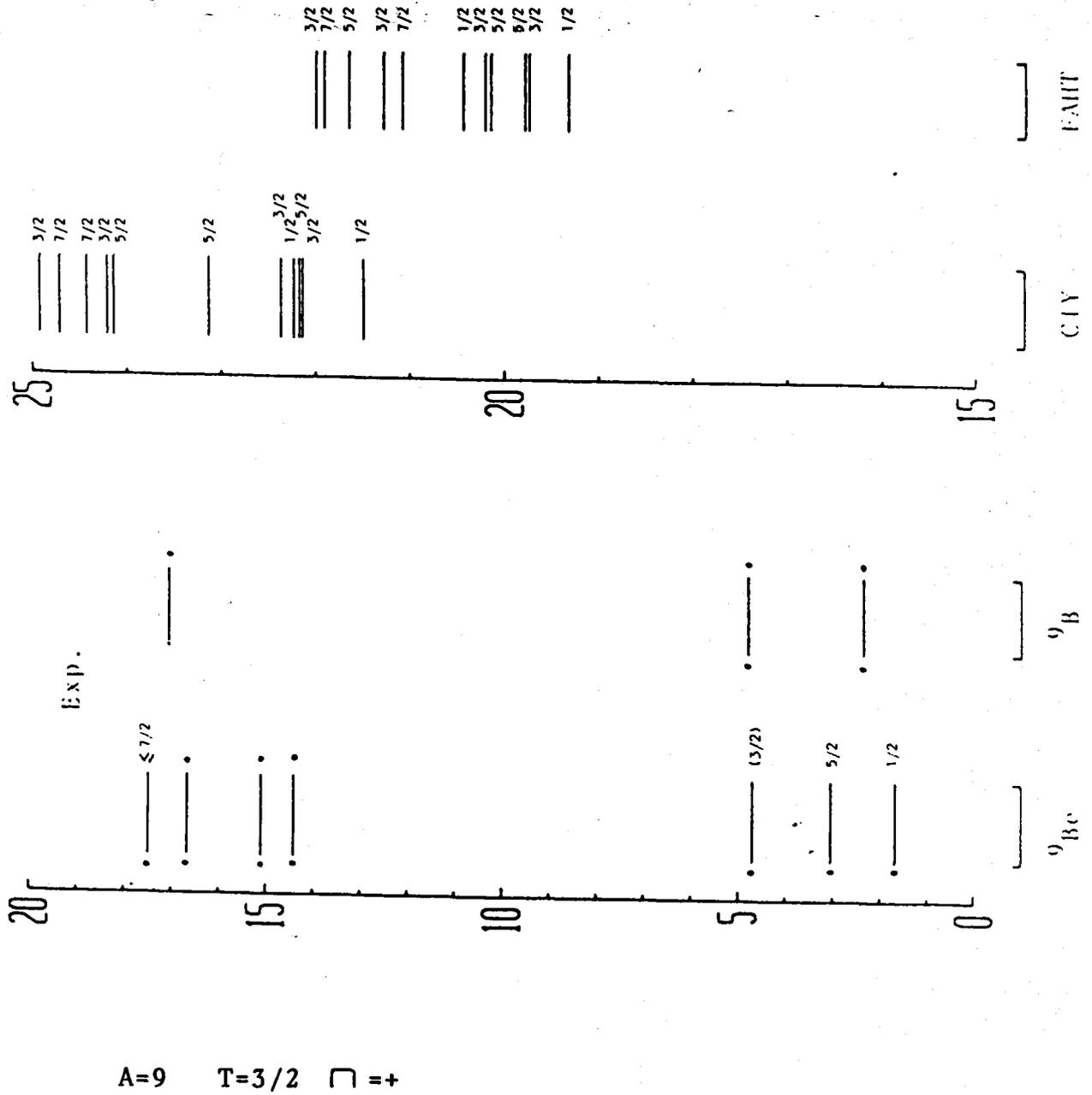


FIGURA 44

A=8 T=0

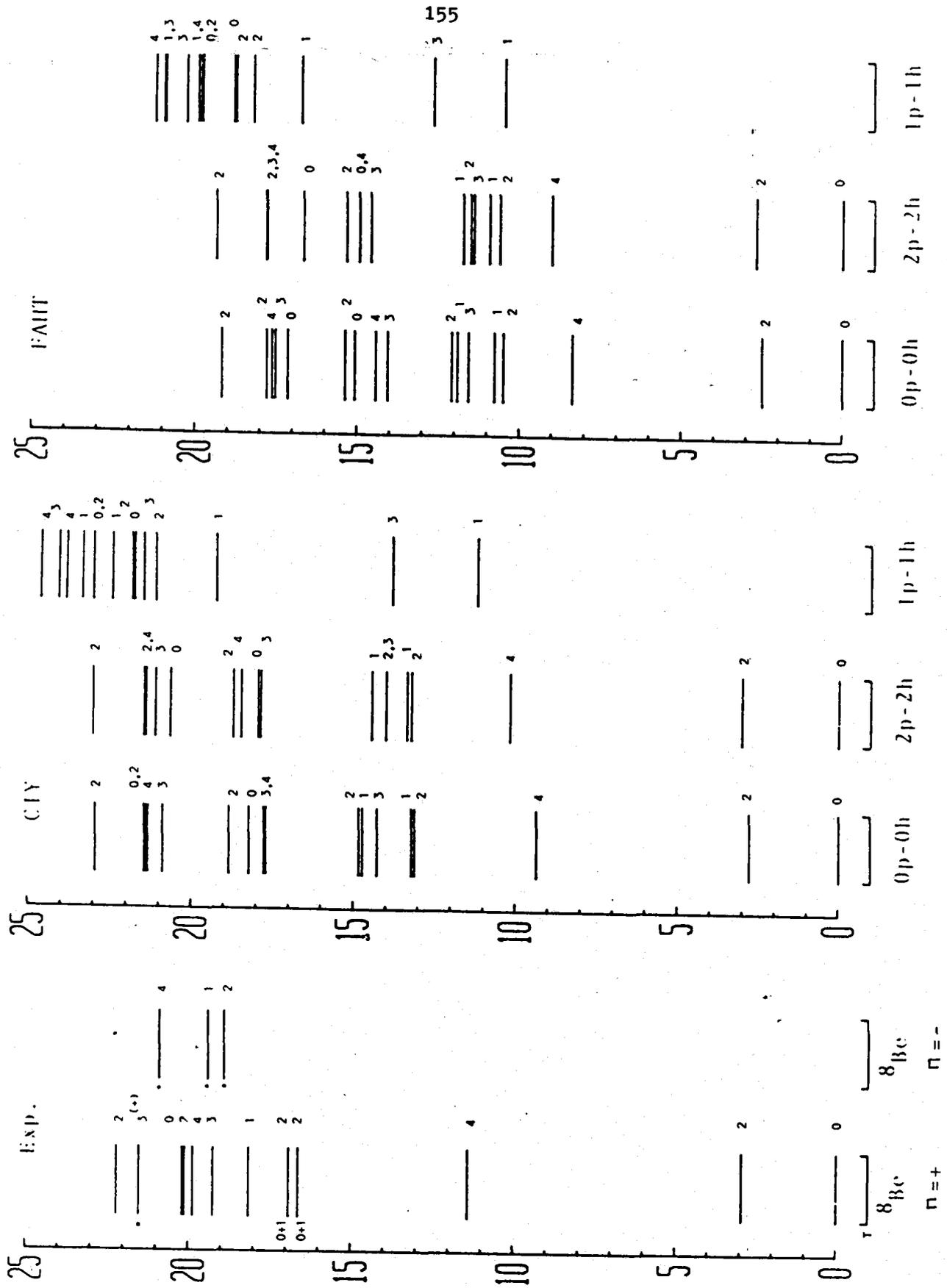
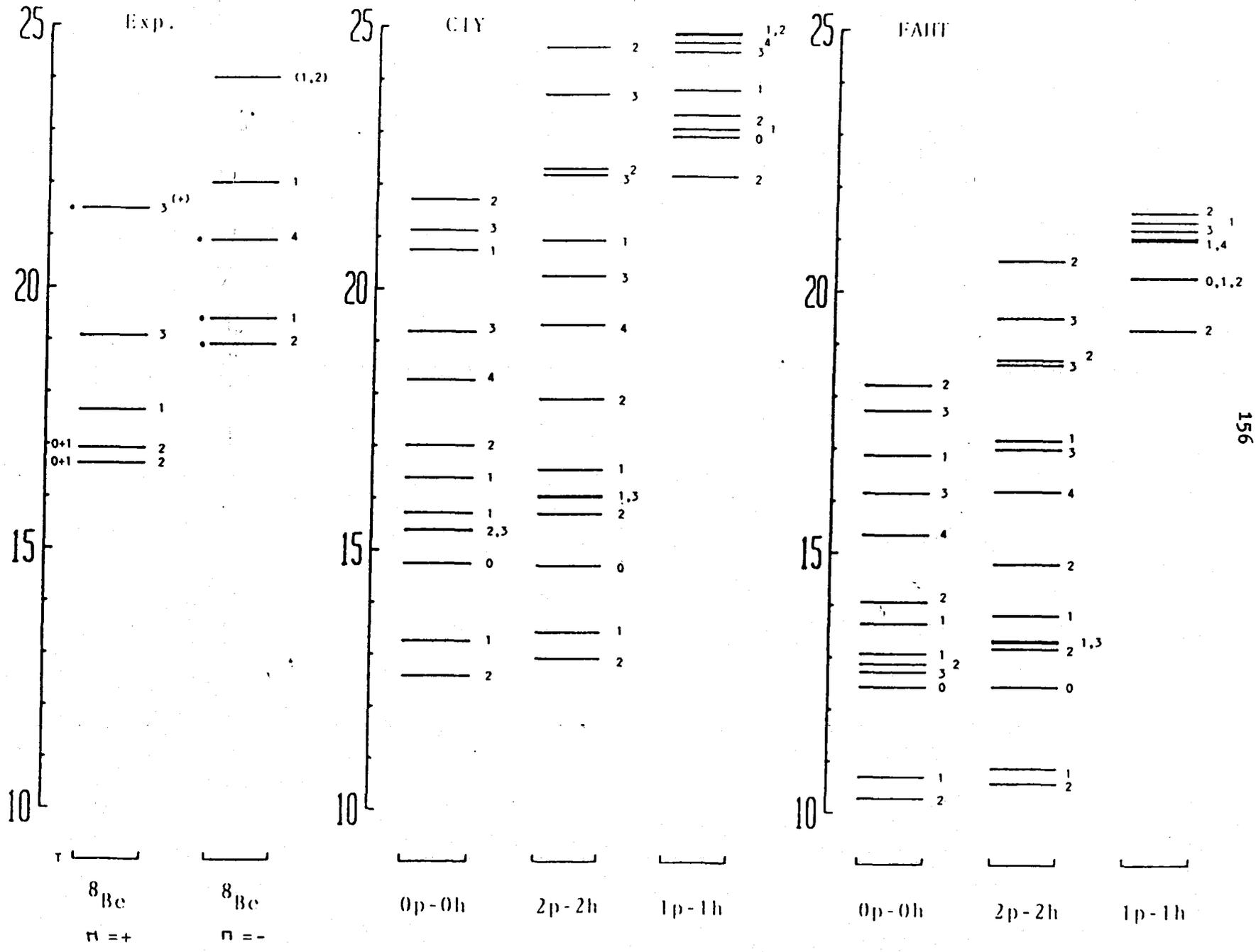


FIGURA 45

A=8  
T=1

FIGURA 46



A=7 T=1/2

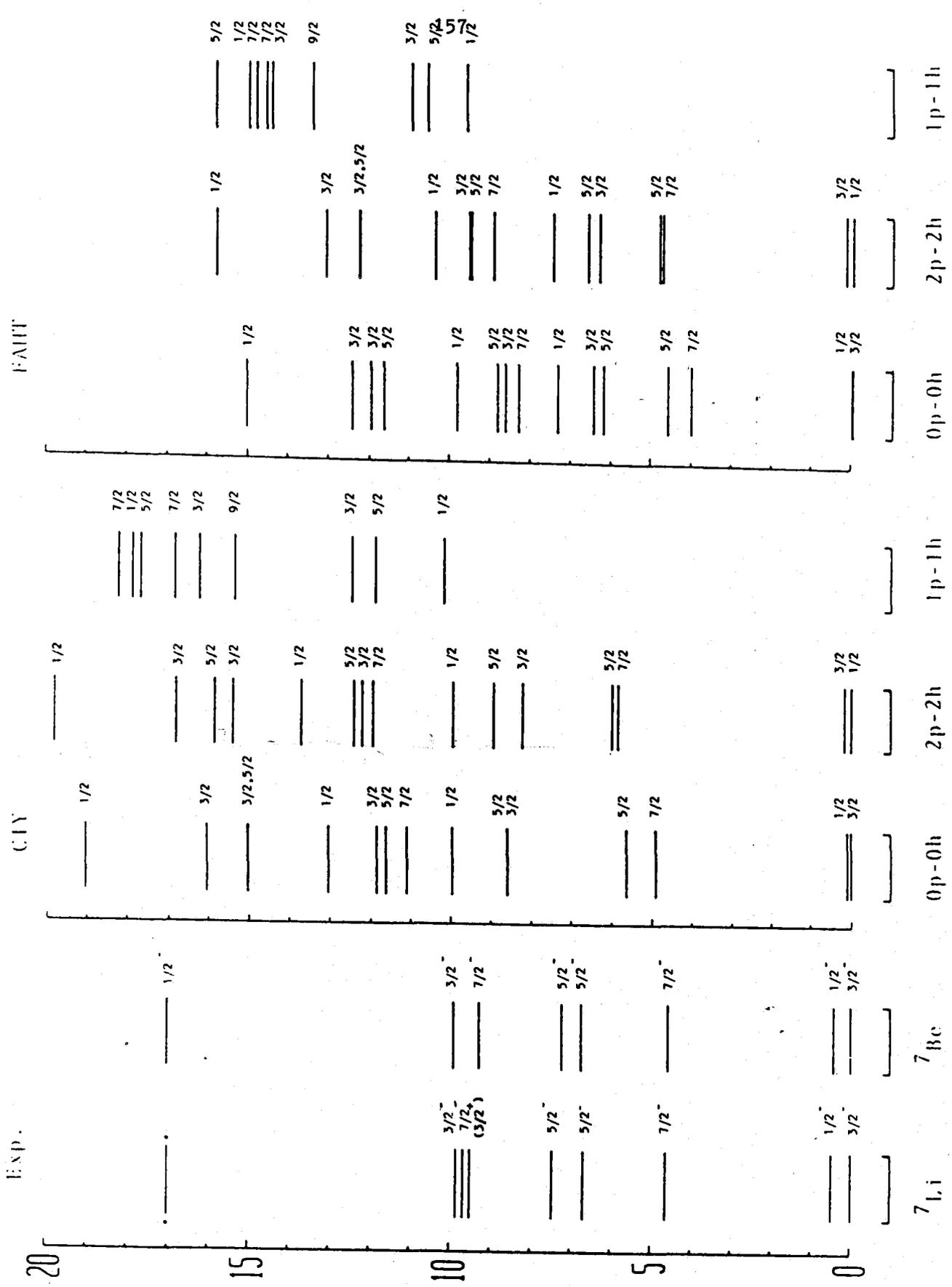
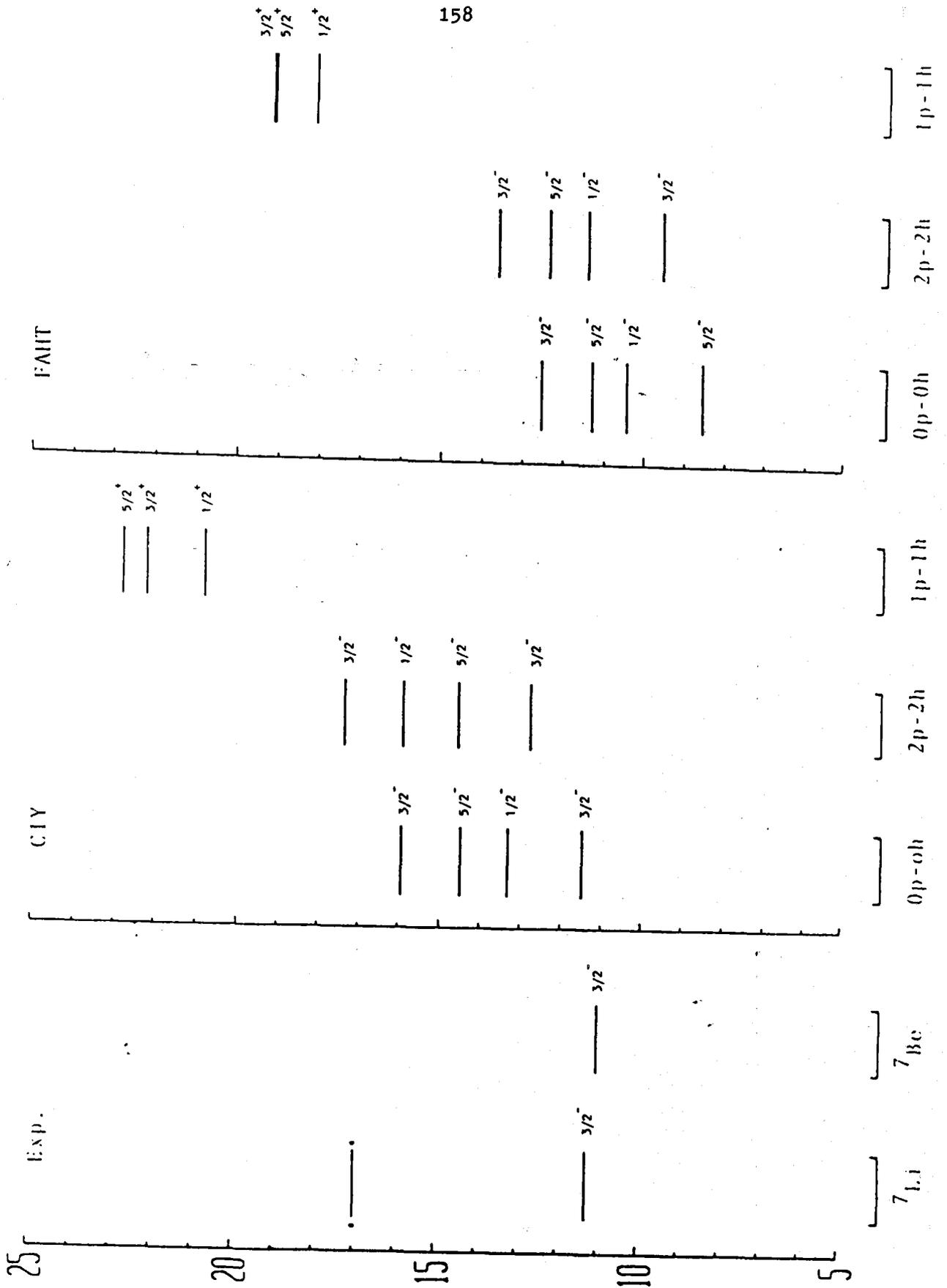
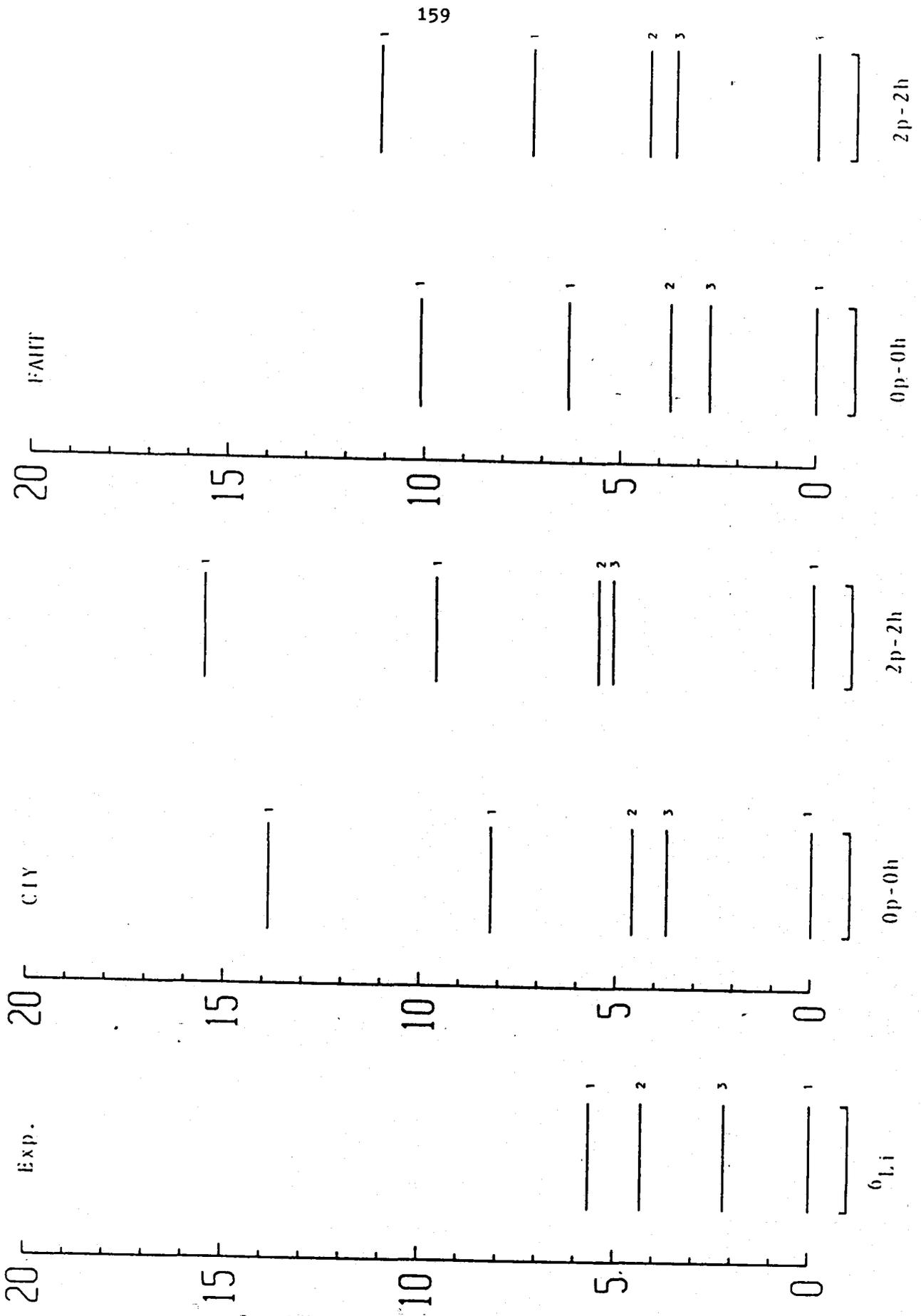


FIGURA 47



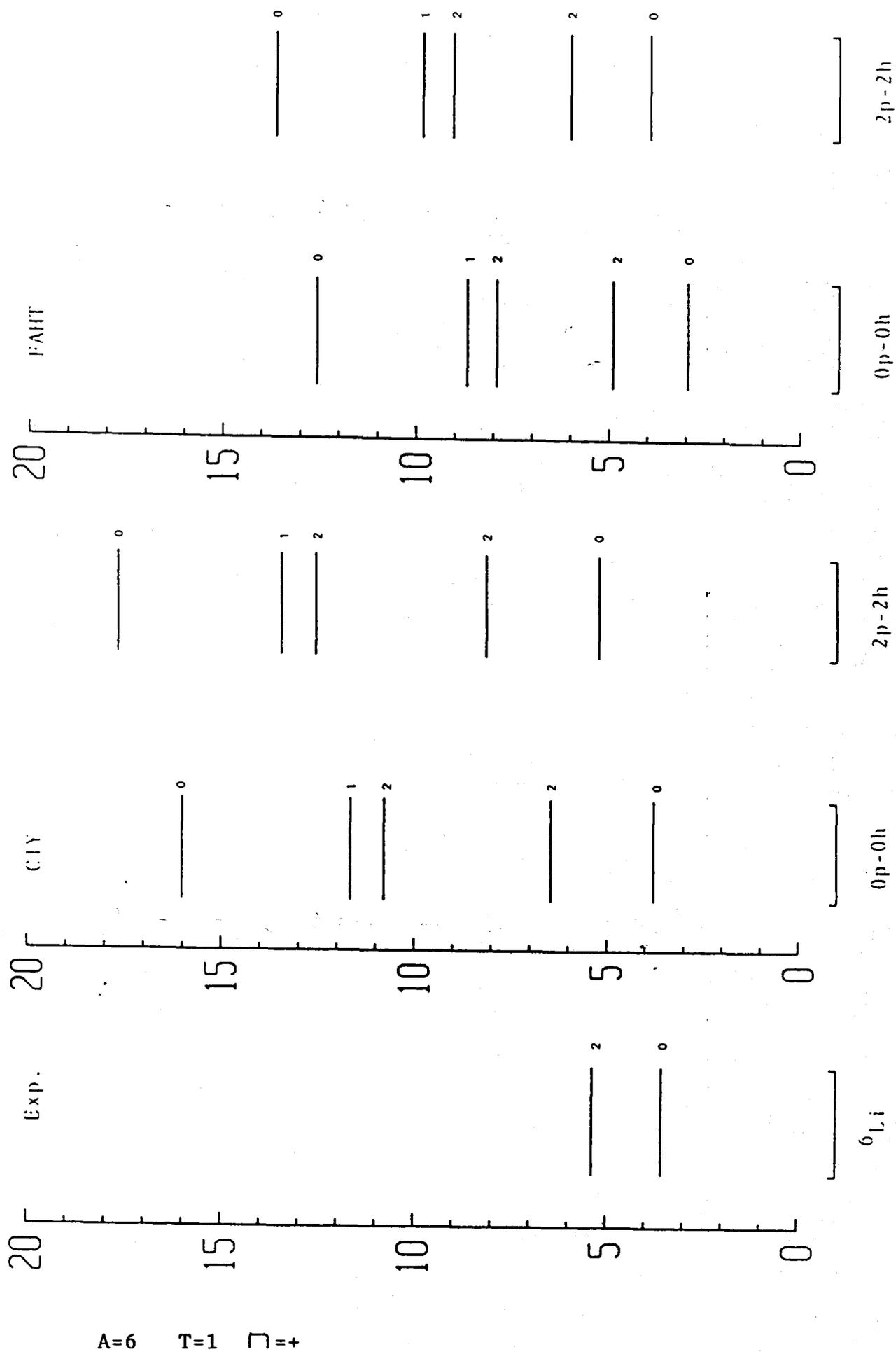
A=7 T=3/2

FIGURA 48



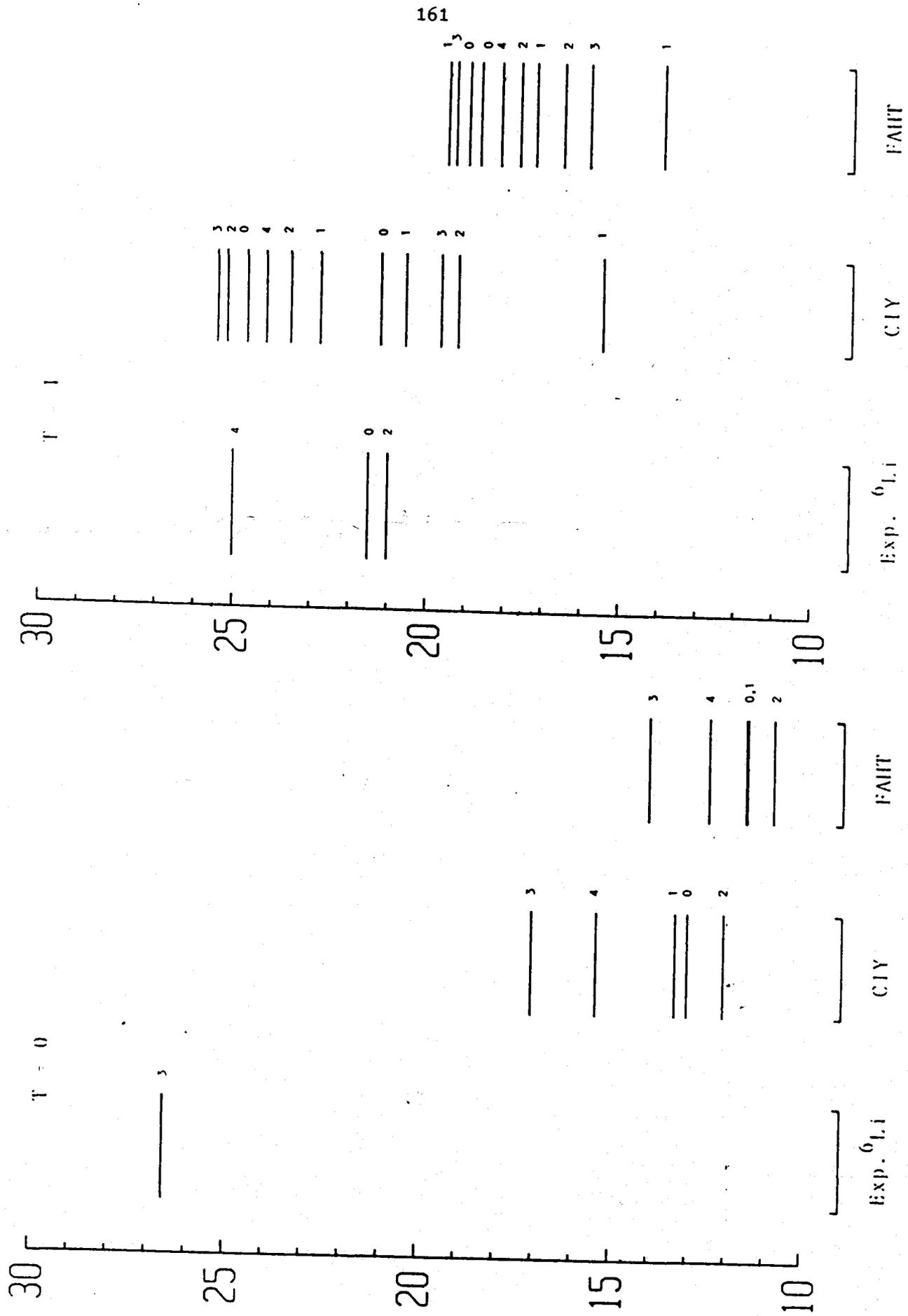
A=6 T=0  $\square=+$

FIGURA 49



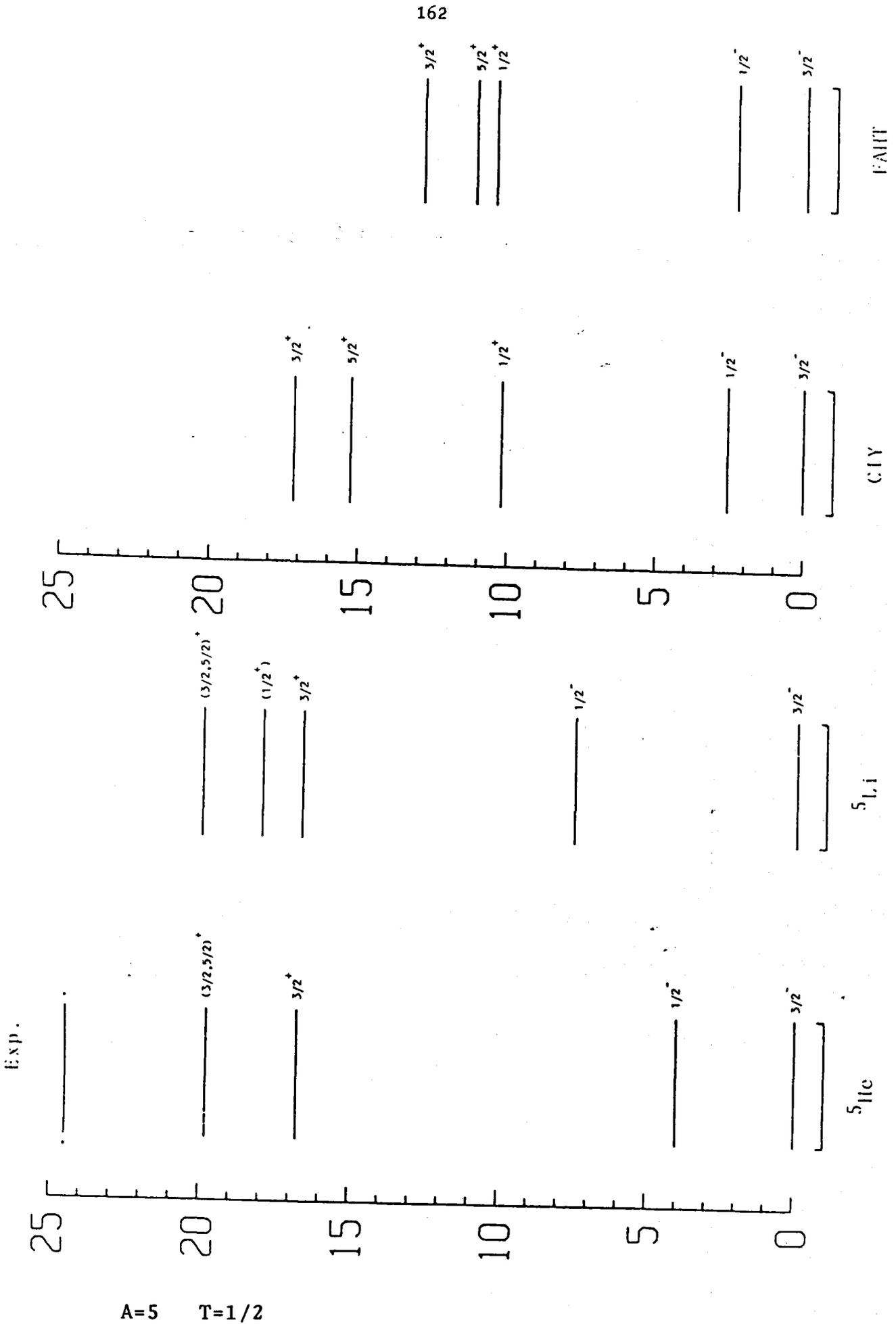
A=6 T=1  $\square=+$

FIGURA 50



A=6 □ = -

FIGURA 51



A=5 T=1/2

FIGURA 52

8. CONCLUSIONES.

El trabajo presentado aplica la teoría de funciones de base correlacionada, CBF, a la descripción tanto de los estados fundamentales de los núcleos ligeros en capa 0p como de su espectroscopia.

El potencial empleado es el de Reid-V8, y se usan correlaciones dependientes del estado, configurándose el cálculo como una variación con restricciones a bajo orden, LOCV, de manera que las funciones radiales componentes del factor de correlación empleado en cada núcleo son determinadas mediante la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales de Euler-Lagrange.

Para el cálculo de los distintos elementos de matriz necesarios, las correlaciones han sido tratadas mediante la aplicación de dos desarrollos distintos en clusters, CIY y FAHT, a fin de comparar sus resultados. Estos desarrollos han sido cortados en segundo orden, controlando su convergencia mediante la imposición sobre el factor de correlación, alternativamente, de dos tipos de restricciones conocidas con los nombres de condición secuencial y condición de Pauli.

Las funciones radiales componentes de la correlación deben cumplir un conjunto de condiciones de frontera esencialmente consistentes en tomar un valor unidad a partir de cierta distancia, denominada como distancia de healing. Este valor debe alcanzarse además con pendiente nula.

La imposición de las condiciones de frontera, con la consiguiente determinación de la distancia de healing en función de la condición subsidiaria elegida y el valor del parámetro del oscilador  $\hbar\omega$  usado, permite obtener, mediante un tratamiento variacional del estado fundamental de cada núcleo, el conjunto de

ecuaciones de Euler-Lagrange cuya resolución proporciona la especificación completa del factor de correlación.

Es la primera vez que un cálculo CBF de estas características es sistemáticamente aplicado a los núcleos en capa p, tengan o no capas cerradas.

En el capítulo séptimo de esta memoria se describen detalladamente todos los resultados obtenidos. Específicamente, los rasgos más sobresalientes de nuestro estudio son:

1) Reproducción adecuada de la sistemática de las energías de los estados fundamentales para los distintos núcleos, con un buen comportamiento cualitativo de las correspondientes energías de ligadura por partícula.

2) Los valores de momento angular y de isoespín asociados con cada estado fundamental en nuestro cálculo coinciden, en casi todos los casos, con los experimentales. Cuando esto no es así, los estados excitados correspondientes se hallan muy próximos a los fundamentales.

3) Los espectros presentados permiten en general una discreta identificación de sus primeros niveles con los experimentales.

4) Obtención de espectros que, si cualitativamente pueden ser comparables con los experimentales, cuantitativamente en general contienen excitaciones demasiado elevadas.

5) Conforme nos acercamos al borde de la capa p, aumentando el número másico, los resultados van empeorando.

6) Los dos desarrollos en clusters utilizados, CIY y FAHT, proporcionan resultados cualitativamente muy similares.

**APENDICES.**

APENDICE A:

FORMULAS DE REDUCCION A ELEMENTOS DE MATRIZ DE DOS CUERPOS.

- A.1. Elementos de matriz entre funciones de una capa.
- A.2. Elementos de matriz entre funciones de dos capas.
- A.3. Elementos de matriz entre funciones de tres capas (0p0h).
- A.4. Elementos de matriz entre funciones de cuatro capas (1p1h).
- A.5. Elementos de matriz entre funciones de cinco capas (2p2h).
- A.6. Elementos de matriz entre funciones de tres y cinco capas (0p0h-2p2h).

A.1. Elementos de matriz entre funciones de una capa.

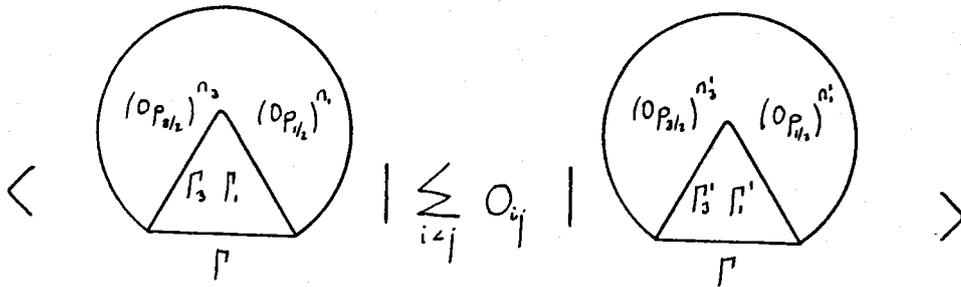
$$\left\langle \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^q \\ r \end{array} \middle| \sum_{1 \leq i < j \leq q} O_{ij} \middle| \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^q \\ r \end{array} \right\rangle$$

$$= \binom{q}{2} \sum_{\omega \neq \emptyset} \langle z^q : r \mid z^{q-2} : \omega [z^2 : \emptyset] \rangle^{\omega} \left\langle \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^2 \\ \emptyset \end{array} \middle| O_{12} \middle| \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^2 \\ \emptyset \end{array} \right\rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^{q/2+2} \\ \emptyset \end{array} \middle| \sum_{i < j} O_{ij} \middle| \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^{q/2+2} \\ \emptyset \end{array} \right\rangle$$

$$= \sum_{\emptyset} (2\emptyset + 1) \left\langle \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^2 \\ \emptyset \end{array} \middle| O_{12} \middle| \begin{array}{c} \text{semicircle} \\ z^2 \\ \emptyset \end{array} \right\rangle$$

A.2. Elementos de matriz entre funciones de dos capas.



Casos:

1  $n'_3 = n_3$   
 $n'_1 = n_1$

2  $n'_3 = n_3 - 1$   
 $n'_1 = n_1 + 1$

3  $n'_3 = n_3 - 2$   
 $n'_1 = n_1 + 2$

$$1. \left\langle \left( \begin{array}{c} (O_{\beta_{34}})^{n_3} \quad (O_{\beta_4})^{n_1} \\ \beta_3 \quad \beta_1 \\ \Gamma \end{array} \right) \middle| \sum_{i < j} O_{ij} \middle| \left( \begin{array}{c} (O_{\beta_{34}})^{n_3} \quad (O_{\beta_4})^{n_1} \\ \beta'_3 \quad \beta'_1 \\ \Gamma \end{array} \right) \right\rangle$$

$$= \int_{\beta_3, \beta'_3} \int_{\beta_1, \beta'_1} \left( \left\langle \left( \begin{array}{c} (O_{\beta_{34}})^{n_3} \\ \beta_3 \end{array} \right) \middle| \sum_{i < j \in \beta_{34}} O_{ij} \middle| \left( \begin{array}{c} (O_{\beta_{34}})^{n_3} \\ \beta_3 \end{array} \right) \right\rangle \right. \\ \left. \left\langle \left( \begin{array}{c} (O_{\beta_4})^{n_1} \\ \beta_1 \end{array} \right) \middle| \sum_{i < j \in \beta_4} O_{ij} \middle| \left( \begin{array}{c} (O_{\beta_4})^{n_1} \\ \beta_1 \end{array} \right) \right\rangle \right)$$

$$+ n_3 \cdot n_1 \cdot \sum_{\sigma \in \omega \theta} \langle (\beta_{34})^{n_3} : \beta_3 | (\beta_{34})^{n_3-1} : \sigma \rangle \cdot \langle (\beta_4)^{n_1} : \beta_1 | (\beta_4)^{n_1-1} : \sigma \rangle \cdot \\ \cdot \langle (\beta_4)^{n_1} : \beta_1 | (\beta_4)^{n_1-1} : \varepsilon \rangle \cdot \langle (\beta_4)^{n_1} : \beta'_1 | (\beta_4)^{n_1-1} : \varepsilon \rangle \cdot \\ \cdot u(\beta_3 \beta_1 \Gamma \varepsilon ; \omega \beta_1) \cdot u(\beta'_3 \beta'_1 \Gamma \varepsilon ; \omega \beta'_1) \cdot \\ \cdot u(\sigma \beta_3 \omega \beta_1 ; \beta_3 \theta) \cdot u(\sigma \beta_3 \omega \beta_1 ; \beta'_3 \theta) \dots$$

$$\left\langle \left( \begin{array}{c} \beta_{34} \quad \beta_{14} \\ \beta \\ \Theta \end{array} \right) \middle| O_{12} \middle| \left( \begin{array}{c} \beta_{34} \quad \beta_{14} \\ \beta \\ \Theta \end{array} \right) \right\rangle$$

$$2. \left\langle \begin{array}{c} (0_{\beta_{34}})^{n_3} \quad (0_{\beta_{12}})^{n_1} \\ \beta_3 \quad \beta_1 \\ \Gamma \end{array} \right| \sum_{i,j} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (0_{\beta_{34}})^{n_3-1} \quad (0_{\beta_{12}})^{n_1+1} \\ \beta_3' \quad \beta_1' \\ \Gamma \end{array} \right\rangle$$

$$= \sqrt{\frac{n_1+1}{n_3}} \cdot (-1)^{n_3 + \beta_{\beta_1} + \beta_1 - \beta_1'}$$

$$\cdot \left\{ (n_3-1) \cdot \langle (\beta_{12})^{n_1+1} : \beta_1' | (\beta_{12})^{n_1} : \beta_1 \rangle \cdot u(\beta_3' \beta_{\beta_1} \beta_1 \beta_1 ; \beta_3 \beta_1') \cdot \right.$$

$$\cdot \sum_{\omega \Theta} \langle (\beta_{34})^{n_3-1} : \beta_3' | (\beta_{34})^{n_3-2} : \omega \rangle \cdot \langle (\beta_{12})^{n_3} : \beta_3 | (\beta_{34})^{n_3-2} : \omega [(\beta_{34})^2 : \Theta] \rangle \cdot$$

$$\cdot u(\omega \beta_{\beta_3} \beta_3 \beta_{\beta_1} ; \beta_3' \Theta) \cdot \left\langle \begin{array}{c} \beta_{34}^2 \\ \Theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \beta_{12} \quad \beta_{12} \\ \Theta \end{array} \right\rangle$$

$$- n_1 \cdot \langle (\beta_{34})^{n_3} : \beta_3 | (\beta_{34})^{n_3-1} : \beta_3' \rangle \cdot u(\beta_3' \beta_{\beta_3} \beta_3 \beta_1 ; \beta_3 \beta_1')$$

$$\cdot \sum_{\omega \Theta} (-1)^\Theta \cdot \langle (\beta_{12})^{n_1} : \beta_1 | (\beta_{12})^{n_1-1} : \omega \rangle \cdot \langle (\beta_{12})^{n_1+1} : \beta_1' | (\beta_{12})^{n_1-1} : \omega [(\beta_{12})^2 : \Theta] \rangle \cdot$$

$$\cdot u(\omega \beta_{\beta_1} \beta_1' \beta_{\beta_3} ; \beta_1' \Theta) \cdot \left\langle \begin{array}{c} \beta_{12} \quad \beta_{12} \\ \Theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \beta_{12}^2 \\ \Theta \end{array} \right\rangle \Bigg\}$$

$$\langle \theta \left| \begin{array}{c} \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \end{array} \right| 0 \rangle \left| \begin{array}{c} \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \end{array} \right| \theta \rangle \times \dots$$

$$\langle \theta \left| \begin{array}{c} \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \end{array} \right| \dots \rangle \times \langle \theta \left| \begin{array}{c} \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \end{array} \right| \dots \rangle \times \dots$$

$$\frac{1}{2} \sqrt{\frac{2}{(n_1+1)(n_1+2) \dots (n_1+n_2-1)(n_1+n_2)}} \times (-1)^{n_1-n_2}$$

$$\langle \dots \left| \begin{array}{c} \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \end{array} \right| \dots \rangle \sum_{z_j} \left| \begin{array}{c} \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \\ \text{P} \end{array} \right| \dots \rangle$$

A.3. Elementos de matriz entre funciones de tres capas.

$$\left\langle \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n_1} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n_1} \\ \Gamma \\ \rho \end{array} \right| \sum_{i \neq j} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n'_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n'_3} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n'_1} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n'_1} \\ \Gamma \\ \rho \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{n_3, n'_3} \int_{n_1, n'_1} \int_{\beta_3, \beta'_3} \int_{\beta_1, \beta'_1} \left\langle \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ \rho \end{array} \right| \sum_{i \neq j, i, j \in P} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (O_{\beta_{1,2}})^{n_1} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n_1} \\ \rho \end{array} \right\rangle$$

$$+ \left\langle \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ \Gamma \\ \rho \end{array} \right| \sum_{\substack{i \neq j \\ \epsilon \in P}} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n'_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n'_3} \\ \Gamma \\ \rho \end{array} \right\rangle$$

$$+ \left\langle \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n_3} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n_1} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n_1} \\ \Gamma \\ \rho \end{array} \right| \sum_{i \in S} \sum_{j \in P} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (O_{\beta_{3,1}})^{n'_3} \\ (O_{\beta_{3,1}})^{n'_3} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n'_1} \\ (O_{\beta_{1,2}})^{n'_1} \\ \Gamma \\ \rho \end{array} \right\rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (0s_{12})^4 \\ \circ \\ \Gamma_3 \\ \Gamma_1 \\ (0p_{12})^{n_3} \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i \in S} \sum_{j \in P} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \begin{array}{c} (0s_{12})^4 \\ \circ \\ \Gamma_3' \\ \Gamma_1' \\ (0p_{12})^{n_3'} \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{n_3, n_3'} \cdot \int_{n_1, n_1'} \cdot \int_{\Gamma_3, \Gamma_3'} \cdot \int_{\Gamma_1, \Gamma_1'}$$

$$\times \left\{ \frac{n_3}{8} + \sum_{\theta} (2\theta + 1) \left\langle \begin{array}{c} s_{1/2} \\ \triangle \\ p_{3/2} \\ \theta \end{array} \right\rangle \left| O_{12} \right| \left\langle \begin{array}{c} s_{1/2} \\ \triangle \\ p_{3/2} \\ \theta \end{array} \right\rangle \right\}$$

$$+ \frac{n_1}{4} + \sum_{\theta} (2\theta + 1) \left\langle \begin{array}{c} s_{1/2} \\ \triangle \\ p_{1/2} \\ \theta \end{array} \right\rangle \left| O_{12} \right| \left\langle \begin{array}{c} s_{1/2} \\ \triangle \\ p_{1/2} \\ \theta \end{array} \right\rangle \right\}$$

A.4. Elementos de matriz entre funciones de cuatro capas.

$$\langle \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \Gamma \end{array} \mid \sum_{i \neq j} O_{ij} \mid \begin{array}{c} \text{Diagram 2} \\ \Gamma' \end{array} \rangle$$

Diagram 1: A circle containing a triangle with vertices labeled  $(OP_{3/2})^{n_3}$ ,  $(OP_{1/2})^{n_1}$ , and  $(OS_{1/2})^{n_2}$ . The triangle is divided into three regions by lines  $\Gamma_a$ ,  $\Gamma_b$ , and  $\Gamma$ . The region  $(b)'$  is indicated. A small circle is at the bottom vertex.

Diagram 2: A similar circle with primed labels  $(OP_{3/2})^{n'_3}$ ,  $(OP_{1/2})^{n'_1}$ ,  $(OS_{1/2})^{n'_2}$  and primed lines  $\Gamma'_a$ ,  $\Gamma'_b$ ,  $\Gamma'$ . The region  $(b)'$  is indicated. A small circle is at the bottom vertex.

$$= \int_{n_3, n'_3} \int_{n_1, n'_1} \int_{a, a'} \int_{b, b'} \langle \begin{array}{c} \text{Diagram 3} \\ \circ \end{array} \mid \sum_{i \neq j} O_{ij} \mid \begin{array}{c} \text{Diagram 4} \\ \circ \end{array} \rangle$$

Diagram 3: A circle with a small circle at the bottom vertex, containing the label  $(OS_{1/2})^{n_2}$ .

Diagram 4: A circle with a small circle at the bottom vertex, containing the label  $(OS_{1/2})^{n'_2}$ .

$$+ \langle \begin{array}{c} \text{Diagram 5} \\ \Gamma \end{array} \mid \sum_{i \neq j} O_{ij} \mid \begin{array}{c} \text{Diagram 6} \\ \Gamma \end{array} \rangle$$

Diagram 5: A circle containing a triangle with vertices  $(OP_{3/2})^{n_3}$ ,  $(OP_{1/2})^{n_1}$ , and  $(OS_{1/2})^{n_2}$ . The triangle is divided into three regions by lines  $\Gamma_a$ ,  $\Gamma_b$ , and  $\Gamma$ . The region  $(b)'$  is indicated.

Diagram 6: A similar circle with primed labels  $(OP_{3/2})^{n'_3}$ ,  $(OP_{1/2})^{n'_1}$ ,  $(OS_{1/2})^{n'_2}$  and primed lines  $\Gamma'_a$ ,  $\Gamma'_b$ ,  $\Gamma$ . The region  $(b)'$  is indicated.

$$+ \langle \begin{array}{c} \text{Diagram 7} \\ \Gamma \end{array} \mid \sum_{i \in S} \sum_{j \notin S} O_{ij} (1 - P_{ij}) \mid \begin{array}{c} \text{Diagram 8} \\ \Gamma \end{array} \rangle$$

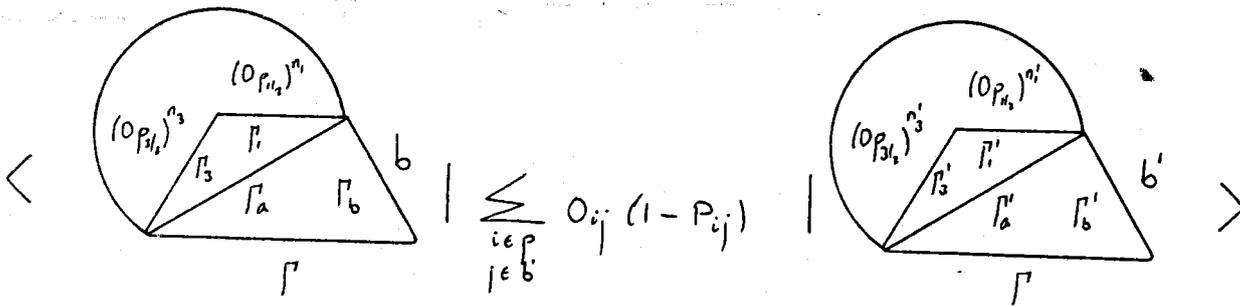
Diagram 7: A circle containing a triangle with vertices  $(OP_{3/2})^{n_3}$ ,  $(OP_{1/2})^{n_1}$ , and  $(OS_{1/2})^{n_2}$ . The triangle is divided into three regions by lines  $\Gamma_a$ ,  $\Gamma_b$ , and  $\Gamma$ . The region  $(b)'$  is indicated. A small circle is at the bottom vertex.

Diagram 8: A similar circle with primed labels  $(OP_{3/2})^{n'_3}$ ,  $(OP_{1/2})^{n'_1}$ ,  $(OS_{1/2})^{n'_2}$  and primed lines  $\Gamma'_a$ ,  $\Gamma'_b$ ,  $\Gamma$ . The region  $(b)'$  is indicated. A small circle is at the bottom vertex.

$$\left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{i_1}})^{n_1} \\ (O_{P_{i_2}})^{n_2} \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ b \\ \Gamma \end{array} \right| \sum_{i < j} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (O_{P_{i_1}})^{n_1} \\ (O_{P_{i_2}})^{n_2} \\ \Gamma_3 \Gamma'_1 \\ \Gamma'_a \Gamma'_b \\ b' \\ \Gamma' \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{\Gamma'_a \Gamma'_b} \times \int_{\Gamma_b \Gamma'_b} \times \int_{b b'} \times \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{i_1}})^{n_1} \\ (O_{P_{i_2}})^{n_2} \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \\ \Gamma_a \end{array} \right| \sum_{\substack{i < j \\ \in P}} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (O_{P_{i_1}})^{n_1} \\ (O_{P_{i_2}})^{n_2} \\ \Gamma_3 \Gamma'_1 \\ \Gamma_a \\ \Gamma_a \end{array} \right\rangle$$

$$+ \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{i_1}})^{n_1} \\ (O_{P_{i_2}})^{n_2} \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ b \\ \Gamma \end{array} \right| \sum_{\substack{i \in P \\ j \in b}} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (O_{P_{i_1}})^{n_1} \\ (O_{P_{i_2}})^{n_2} \\ \Gamma_3 \Gamma'_1 \\ \Gamma'_a \Gamma'_b \\ b' \\ \Gamma \end{array} \right\rangle$$



Casos:

$$1. \quad \begin{aligned} n'_3 &= n_3 \\ n'_1 &= n_1 \end{aligned}$$

$$2. \quad \begin{aligned} n'_3 &= n_3 - 1 \\ n'_1 &= n_1 + 1 \end{aligned}$$

$$7. \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle with } (0, \beta_{34})^{\alpha_3} \text{ and } (0, \beta_{44})^{\alpha_4} \\ \text{Triangle with vertices } \beta_3, \beta_1, \beta_2, \beta_a, \beta_b \\ \text{Base } \beta_1, \text{ height } \beta_2 \end{array} \right| \sum_{\substack{i \in P \\ j \in b'}} O_{ij} (1 - P_{ij}) \cdot \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle with } (0, \beta_{34})^{\alpha_3} \text{ and } (0, \beta_{44})^{\alpha_4} \\ \text{Triangle with vertices } \beta'_3, \beta'_1, \beta'_2, \beta'_a, \beta'_b \\ \text{Base } \beta'_1, \text{ height } \beta'_2 \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{\beta_3, \beta'_3} \times \eta_1 \times \sum_{\epsilon \omega \theta} \langle (\beta_{44})^{\alpha_4} : \beta_1 | (\beta_{44})^{\alpha_4} : \omega \rangle \cdot \langle (\beta_{44})^{\alpha_4} : \beta'_1 | (\beta_{44})^{\alpha_4} : \omega \rangle \cdot$$

$$\times U(\beta_3, \beta_1, \beta_2, \beta_b; \beta_a, \epsilon) \times U(\beta_3, \beta'_1, \beta_2, \beta'_b; \beta'_a, \epsilon) \cdot$$

$$\times U(\omega, \beta_{\beta_1}, \epsilon, \beta_b; \beta_1, \theta) \times U(\omega, \beta_{\beta'_1}, \epsilon, \beta'_b; \beta'_1, \theta) \cdot$$

$$\times \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle with } \beta_{12} \text{ and } b \\ \text{Triangle with base } \beta_{12}, \text{ height } b \\ \text{Bottom } \theta \end{array} \right| O_{12} \cdot \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle with } \beta'_{12} \text{ and } b' \\ \text{Triangle with base } \beta'_{12}, \text{ height } b' \\ \text{Bottom } \theta \end{array} \right\rangle$$

$$+ (-1)^{\beta_3 - \beta'_3 - \beta_a + \beta'_a} \times \int_{\beta_1, \beta'_1} \times \eta_3 \times \sum_{\epsilon \omega \theta} \langle (\beta_{44})^{\alpha_4} : \beta_3 | (\beta_{44})^{\alpha_4} : \omega \rangle \cdot \langle (\beta_{44})^{\alpha_4} : \beta'_3 | (\beta_{44})^{\alpha_4} : \omega \rangle \cdot$$

$$\times U(\beta_1, \beta_3, \beta_2, \beta_b; \beta_a, \epsilon) \times U(\beta_1, \beta'_3, \beta_2, \beta'_b; \beta'_a, \epsilon) \cdot$$

$$\times U(\omega, \beta_{\beta_3}, \epsilon, \beta_b; \beta_3, \theta) \times U(\omega, \beta_{\beta'_3}, \epsilon, \beta'_b; \beta'_3, \theta) \cdot$$

$$\times \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle with } \beta_{34} \text{ and } b \\ \text{Triangle with base } \beta_{34}, \text{ height } b \\ \text{Bottom } \theta \end{array} \right| O_{12} \cdot \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle with } \beta'_{34} \text{ and } b' \\ \text{Triangle with base } \beta'_{34}, \text{ height } b' \\ \text{Bottom } \theta \end{array} \right\rangle$$

$$2. \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle} \\ \text{Triangle} \\ \text{Labels: } (0_{\beta_{3i}})^{n_i}, (0_{\beta_{3i'}})^{n_i-1}, \beta_3, \beta_3', \Gamma_1, \Gamma_1', \Gamma_a, \Gamma_a', \Gamma_b, \Gamma_b', \Gamma \end{array} \right| \sum_{\substack{i \in \beta \\ j \in \beta'}} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} \text{Circle} \\ \text{Triangle} \\ \text{Labels: } (0_{\beta_{3i'}})^{n_i+1}, (0_{\beta_{3i}})^{n_i-1}, \beta_3', \beta_3, \Gamma_1', \Gamma_1, \Gamma_a', \Gamma_a, \Gamma_b', \Gamma_b, \Gamma \end{array} \right\rangle$$

$$= (-1)^{n_i} \cdot (-1)^{2\beta_3 + \beta_b} \cdot \sqrt{n_3(n_i+1)}$$

$$\times \langle (\beta_{3i})^{n_3} : \beta_3 \mid (\beta_{3i'})^{n_3-1} : \beta_3' \rangle \times \langle (\beta_{3i'})^{n_i+1} : \beta_3' \mid (\beta_{3i})^{n_i} : \beta_3 \rangle$$

$$\times \sum_{\varepsilon \omega \theta} (-1)^{-2\omega - \theta} \cdot U(\beta_3 \Gamma_1 \Gamma \Gamma_b ; \Gamma_a \varepsilon) \cdot U(\beta_3' \Gamma_1' \Gamma \Gamma_b' ; \Gamma_a' \omega)$$

$$\times U(\Gamma_3 \Gamma_b \omega \Gamma_1 ; \theta \varepsilon) \times U(\Gamma_3' \Gamma_b' \omega \Gamma_1' ; \theta \varepsilon')$$

$$\times U(\beta_3' \Gamma_3 \Gamma \varepsilon ; \beta_3 \omega) \times \left\langle \begin{array}{c} \text{Circle} \\ \text{Triangle} \\ \text{Labels: } \beta_{3i}, \beta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \text{Circle} \\ \text{Triangle} \\ \text{Labels: } \beta_{3i'}, \beta' \end{array} \right\rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (O_{\beta_3, \Gamma_3})^3 \\ \beta_3 \Gamma_3 \\ (O_{\beta_2, \Gamma_2})^2 \\ \beta_2 \Gamma_2 \\ (O_{\beta_1, \Gamma_1})^1 \\ \beta_1 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \\ \Gamma_b \\ b \\ \Gamma \end{array} \right| \sum_{i \in S} \sum_{j \notin S} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (O_{\beta_3, \Gamma_3})^3 \\ \beta_3 \Gamma_3 \\ (O_{\beta_2, \Gamma_2})^2 \\ \beta_2 \Gamma_2 \\ (O_{\beta_1, \Gamma_1})^1 \\ \beta_1 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \\ \Gamma_b \\ b' \\ \Gamma \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{n_3, n_3'} \times \int_{n_1, n_1'} \times \int_{a, a'}$$

$$\times \left\{ \int_{b, b'} \times \left\langle \begin{array}{c} (O_{\beta_3, \Gamma_3})^3 \\ \beta_3 \Gamma_3 \\ (O_{\beta_2, \Gamma_2})^2 \\ \beta_2 \Gamma_2 \\ (O_{\beta_1, \Gamma_1})^1 \\ \beta_1 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \\ \Gamma_b \\ b \\ \Gamma_a \end{array} \right| \sum_{i \in S} \sum_{j \notin S} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (O_{\beta_3, \Gamma_3})^3 \\ \beta_3 \Gamma_3 \\ (O_{\beta_2, \Gamma_2})^2 \\ \beta_2 \Gamma_2 \\ (O_{\beta_1, \Gamma_1})^1 \\ \beta_1 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \\ \Gamma_b \\ b' \\ \Gamma_a \end{array} \right\rangle \right.$$

$$\left. + \int_{\Gamma_b, \Gamma_b'} \times \frac{1}{2\Gamma_b + 1} \times \sum_{\vartheta} (2\vartheta + 1) \left\langle \begin{array}{c} S_{1/2} \\ b \\ \vartheta \end{array} \right| \cdot O_{12} \cdot \left| \begin{array}{c} S_{1/2} \\ b' \\ \vartheta \end{array} \right\rangle \right\}$$

A.5. Elementos de matriz entre funciones de cinco capas.

$$\left\langle \begin{array}{c} (Op_{34})^{n_3} \quad (Op_{12})^{n_1} \\ (Os_{12})^4 \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \quad (b_1)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ \circ \end{array} \right\rangle \Big| \sum_{i \neq j} O_{ij} \Big| \left\langle \begin{array}{c} (Op_{34})^{n'_3} \quad (Op_{12})^{n'_1} \\ (Os_{12})^4 \\ \Gamma'_3 \Gamma'_1 \quad (b_1)'' \\ \Gamma'_a \Gamma'_b \\ \Gamma \\ \circ \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{a,a'} \times \int_{b,b'} \times \int_{n_3,n'_3} \times \int_{n_1,n'_1} \times \int_{b_1,b'_1} \times \int_{b_2,b'_2} \times \left\langle \begin{array}{c} (Os_{12})^4 \\ \circ \end{array} \right\rangle \Big| \sum_{i \neq j} O_{ij} \Big| \left\langle \begin{array}{c} (Os_{12})^4 \\ \circ \end{array} \right\rangle$$

$$+ \left\langle \begin{array}{c} (Op_{34})^{n_3} \quad (Op_{12})^{n_1} \quad (b_1)' \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \quad \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ \circ \end{array} \right\rangle \Big| \sum_{\substack{i \neq j \\ f \neq s}} O_{ij} \Big| \left\langle \begin{array}{c} (Op_{34})^{n'_3} \quad (Op_{12})^{n'_1} \quad (b_1)'' \\ \Gamma'_3 \Gamma'_1 \quad \Gamma'_a \Gamma'_b \\ \Gamma \\ \circ \end{array} \right\rangle$$

$$+ \left\langle \begin{array}{c} (Op_{34})^{n_3} \quad (Op_{12})^{n_1} \\ (Os_{12})^4 \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \quad (b_1)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ \circ \end{array} \right\rangle \Big| \sum_{i \in s} \sum_{j \notin s} O_{ij} (1 - P_{ij}) \Big| \left\langle \begin{array}{c} (Op_{34})^{n'_3} \quad (Op_{12})^{n'_1} \\ (Os_{12})^4 \\ \Gamma'_3 \Gamma'_1 \quad (b_1)'' \\ \Gamma'_a \Gamma'_b \\ \Gamma \\ \circ \end{array} \right\rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{s_1}})^{n_1} \quad (O_{P_{s_2}})^{n_2} \\ (O_{s_{t_1}})^v \\ \Gamma_a \quad \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \right| \sum_{i \in S} \sum_{j \notin S} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (O_{P_{s_1}})^{n_1'} \quad (O_{P_{s_2}})^{n_2'} \\ (O_{s_{t_2}})^v \\ \Gamma_a' \quad \Gamma_b' \\ \Gamma \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{n_3, n_3'} \int_{n_1, n_1'} \int_{a, a'} \int_{b, b'}$$

$$\cdot \left\{ \int_{b, b'} \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{s_1}})^{n_1} \quad (O_{P_{s_2}})^{n_2} \\ (O_{s_{t_1}})^v \\ \Gamma_a \quad \Gamma_b \\ \Gamma_a \end{array} \right| \sum_{i \in S} \sum_{j \in P} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (O_{P_{s_1}})^{n_1'} \quad (O_{P_{s_2}})^{n_2'} \\ (O_{s_{t_2}})^v \\ \Gamma_a' \quad \Gamma_b' \\ \Gamma_a \end{array} \right\rangle \right\}$$

$$+ \int_{a, a'} \frac{1}{(2\Gamma_b + 1)} \cdot \sum_{\Gamma_e} (2\Gamma_e + 1) \cdot \left\langle \begin{array}{c} b_1 \\ \Gamma_b \quad \Gamma_b \\ \Gamma_e \end{array} \right| \sum_{j \in b} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} b_1' \\ \Gamma_b' \quad \Gamma_b' \\ \Gamma_e \end{array} \right\rangle \right\}$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (OP_{12})^{n_1} \\ (OP_{31})^{n_3} \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right| \sum_{i < j} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (OP_{12})^{n_1'} \\ (OP_{31})^{n_3'} \\ \Gamma_3' \Gamma_1' \\ \Gamma_a' \Gamma_b' \\ \Gamma \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{n_3, n_3'} \int_{n_1, n_1'} = \int_{a, a'} \int_{b, b'} \left\langle \begin{array}{c} b_1 \\ \Gamma_b \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} b_2 \end{array} \right\rangle O_{12} \left| \begin{array}{c} b_1' \\ \Gamma_b \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} b_2' \end{array} \right\rangle$$

$$+ \int_{\Gamma_a, \Gamma_a'} \int_{b, b'} = \left\langle \begin{array}{c} (OP_{31})^{n_3} \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} (OP_{12})^{n_1} \end{array} \right\rangle \sum_{\substack{i < j \\ \in P}} O_{ij} \left| \begin{array}{c} (OP_{31})^{n_3'} \\ \Gamma_3' \Gamma_1' \\ \Gamma_a \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} (OP_{12})^{n_1'} \end{array} \right\rangle$$

$$+ \left\langle \begin{array}{c} (OP_{12})^{n_1} \\ (OP_{31})^{n_3} \\ \Gamma_3 \Gamma_1 \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle \sum_{i \in P} \sum_{j \in b'} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (OP_{12})^{n_1'} \\ (OP_{31})^{n_3'} \\ \Gamma_3' \Gamma_1' \\ \Gamma_a' \Gamma_b' \\ \Gamma \end{array} \right. \left. \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \end{array} \right| \sum_{i \in p} \sum_{j \in b'} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} \text{Diagram 2} \right\rangle$$

The diagram shows two overlapping circles, each containing a triangle. The left circle is labeled with  $(O_{p,i_3})^{n_3}$  and  $(O_{p,i_1})^{n_1}$ . The right circle is labeled with  $(O_{p,i_3})^{n'_3}$  and  $(O_{p,i_1})^{n'_1}$ . The triangles are labeled with  $\Gamma_a, \Gamma_b$  and  $\Gamma'_a, \Gamma'_b$ . The vertices are labeled  $(b_1)'$  and  $(b_2)'$ . The entire expression is enclosed in large angle brackets  $\langle \dots \rangle$ .

Casos:

$$1. \quad \begin{array}{l} n'_3 = n_3 \\ n'_1 = n_1 \end{array}$$

$$2. \quad \begin{array}{l} n'_3 = n_3 - 1 \\ n'_1 = n_1 + 1 \end{array}$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (OP_{3/2})^{n_3} \\ (OP_{1/2})^{n_1} \\ \Gamma_3 \Gamma_i \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i \in P} \sum_{j \in B} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \left\langle \begin{array}{c} (OP_{3/2})^{n_3} \\ (OP_{1/2})^{n_1} \\ \Gamma_3' \Gamma_i' \\ \Gamma_a' \Gamma_b' \\ \Gamma \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{\Gamma_3, \Gamma_3'} \times \sum_{\Gamma_e} U(\Gamma_3 \Gamma_i \Gamma \Gamma_b ; \Gamma_a \Gamma_e) \times U(\Gamma_3' \Gamma_i' \Gamma \Gamma_b' ; \Gamma_a' \Gamma_e)$$

$$\times \left\langle \begin{array}{c} (OP_{1/2})^{n_1} \\ \Gamma_i \Gamma_b \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i \in P_{1/2}} \sum_{j \in B} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \left\langle \begin{array}{c} (OP_{1/2})^{n_1} \\ \Gamma_i' \Gamma_b' \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$+ (-1)^{\Gamma_3 - \Gamma_3' - \Gamma_a + \Gamma_a'} \int_{\Gamma_i, \Gamma_i'} \times \sum_{\Gamma_e} U(\Gamma_i \Gamma_3 \Gamma \Gamma_b ; \Gamma_a \Gamma_e) \times U(\Gamma_i' \Gamma_3' \Gamma \Gamma_b' ; \Gamma_a' \Gamma_e)$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (OP_{3/2})^{n_3} \\ \Gamma_3 \Gamma_b \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i \in P_{3/2}} \sum_{j \in B} O_{ij} (1 - P_{ij}) \right| \left\langle \begin{array}{c} (OP_{3/2})^{n_3} \\ \Gamma_3' \Gamma_b' \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$\left\langle \begin{array}{c} (0\rho_i)^{n_i} \\ \Gamma_i \Gamma_b \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle \sum_{i \in \rho_i} \sum_{j \in b} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left\langle \begin{array}{c} (0\rho_i)^{n_i} \\ \Gamma_i' \Gamma_b' \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$= n_i \sum_{c \in \rho} \langle (\rho_i)^{n_i} : \Gamma_i | (\rho_i)^{n_i-1} : \Gamma_c \rangle \times \langle (\rho_i)^{n_i} : \Gamma_i' | (\rho_i)^{n_i-1} : \Gamma_c \rangle \times$$

$$\times U(\Gamma_c \Gamma_{\rho_i} \Gamma_e \Gamma_b ; \Gamma_i \Gamma) \times U(\Gamma_c \Gamma_{\rho_i} \Gamma_e \Gamma_b' ; \Gamma_i' \Gamma)$$

$$\left\langle \begin{array}{c} \rho_i \\ \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \begin{array}{c} b_1 \\ b_2 \end{array} \right\rangle \sum_{j \in b} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left\langle \begin{array}{c} \rho_i \\ \Gamma_b' \\ \Gamma \end{array} \begin{array}{c} b_1' \\ b_2' \end{array} \right\rangle$$

$$2. \left\langle \begin{array}{c} (0_{\rho_{3/2}})^{n_3} \quad (0_{\rho_{1/2}})^{n_1} \\ \beta_3 \quad \beta_1 \\ \Gamma_a \quad \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right| \sum_{i \in \rho} \sum_{j \in b} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (0_{\rho_{3/2}})^{n_3-1} \quad (0_{\rho_{1/2}})^{n_1+1} \\ \beta_3' \quad \beta_1' \\ \Gamma_a' \quad \Gamma_b' \\ \Gamma \end{array} \begin{array}{c} (b_1)' \\ (b_2)' \end{array} \right\rangle$$

$$= (-1)^{n_1} \times \sqrt{n_3(n_3+1)} \times (-1)^{2\Gamma_1 + \Gamma_b}$$

$$\times \langle (\rho_{3/2})^{n_3} : \beta_3 \mid (\rho_{3/2})^{n_3-1} : \beta_3' \rangle \times \langle (\rho_{1/2})^{n_1+1} : \beta_1' \mid (\rho_{1/2})^{n_1} : \beta_1 \rangle$$

$$\times \sum_{\Gamma_c \Gamma_d \Gamma_e} (-1)^{-\Gamma_c - \Gamma_d - \Gamma_e} \times U(\Gamma_b' \Gamma_{\rho_1} \Gamma_c \Gamma_1; \Gamma_e \Gamma_1')$$

$$\times U(\beta_3 \Gamma_1 \Gamma \Gamma_b; \Gamma_a \Gamma_d) \times U(\beta_3' \Gamma_1' \Gamma \Gamma_b'; \Gamma_a' \Gamma_c)$$

$$\times U(\beta_3' \Gamma_{\rho_3} \Gamma \Gamma_d; \beta_3 \Gamma_c) \times U(\Gamma_{\rho_3} \Gamma_b \Gamma_c \Gamma_1; \Gamma_e \Gamma_d)$$

$$\times \left\langle \begin{array}{c} \rho_{3/2} \\ \Gamma_b \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} b_1 \\ b_2 \end{array} \right| \sum_{i \in \rho} \sum_{j \in b} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} \rho_{1/2} \\ \Gamma_b' \\ \Gamma_e \end{array} \begin{array}{c} b_1' \\ b_2' \end{array} \right\rangle$$

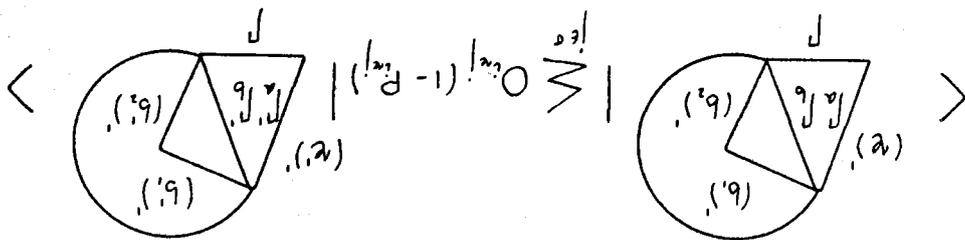
$$4. \begin{cases} b_1 = b'_1 = \sigma \\ b_2 = \sigma' \\ b'_2 = \sigma'' \end{cases}$$

$$3. \begin{cases} b_1 = b'_1 = \sigma \\ b_2 = b'_2 = \sigma' \end{cases}$$

$$2. \begin{cases} b_1 = b_2 = b'_1 = \sigma \\ b'_2 = \sigma' \end{cases}$$

$$1. \begin{cases} b_1 = b_2 = \sigma \\ b'_1 = b'_2 = \sigma' \end{cases}$$

Casos:



$$1. \left\langle \begin{array}{c} (\tau)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ (\sigma)^2 \end{array} \right| \sum_{j \in \sigma} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (\tau) \\ \Gamma'_a \Gamma'_b \\ \Gamma \\ (\sigma)^2 \end{array} \right\rangle$$

$$= 2. \sum_{\theta} u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma} \Gamma \Gamma_{\sigma}; \theta \Gamma_b) \cdot u(\Gamma'_a \Gamma_{\sigma} \Gamma \Gamma_{\sigma}; \theta \Gamma'_b)$$

$$\cdot \int_{\sigma, \sigma'} \left\langle \begin{array}{c} \tau \\ \Gamma \\ \theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \tau' \\ \Gamma \\ \theta \end{array} \right\rangle$$

$$2. \left\langle \begin{array}{c} (\tau)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ (\sigma)^2 \end{array} \right| \sum_{j \in \sigma} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (\sigma)' \\ \Gamma'_a \Gamma'_b \\ \Gamma \\ (\sigma')^2 \end{array} \right\rangle$$

$$= \sqrt{2} \cdot (-1)^{\Gamma_{\sigma} - \Gamma_{\sigma'} - \Gamma_b + \Gamma'_b} \cdot \sum_{\theta} u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma} \Gamma \Gamma_{\sigma}; \theta \Gamma_b) \cdot u(\Gamma'_a \Gamma_{\sigma'} \Gamma \Gamma_{\sigma'}; \theta \Gamma'_b)$$

$$\cdot \left\langle \begin{array}{c} \tau \\ \Gamma \\ \theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \tau' \\ \Gamma \\ \theta \end{array} \right\rangle$$

$$3. \left\langle \begin{array}{c} (\sigma)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ (\sigma)' \end{array} \right| \sum_{j \in \sigma} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (\sigma)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ (\sigma)' \end{array} \right\rangle$$

$$= \sum_{\theta} u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma} \Gamma_{\sigma'}; \theta \Gamma_b) \times u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma} \Gamma_{\sigma'}; \theta \Gamma_b)$$

$$\times \left\langle \begin{array}{c} \sigma \\ \theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \sigma \\ \theta \end{array} \right\rangle$$

$$+ (-1)^{\Gamma_b - \Gamma_b'} \sum_{\theta} u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma'} \Gamma_{\sigma}; \theta \Gamma_b) \times u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma'} \Gamma_{\sigma}; \theta \Gamma_b')$$

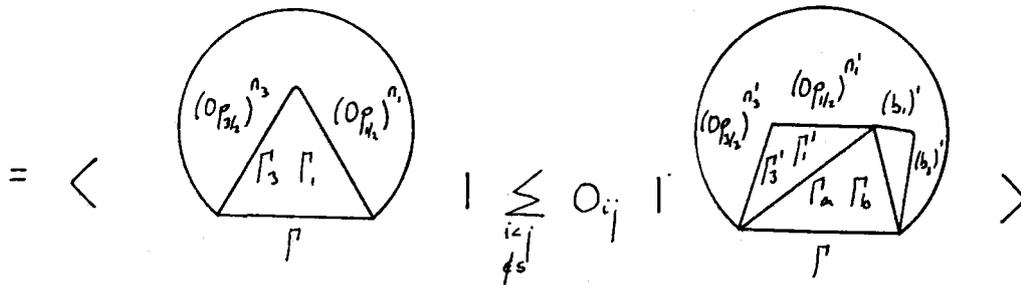
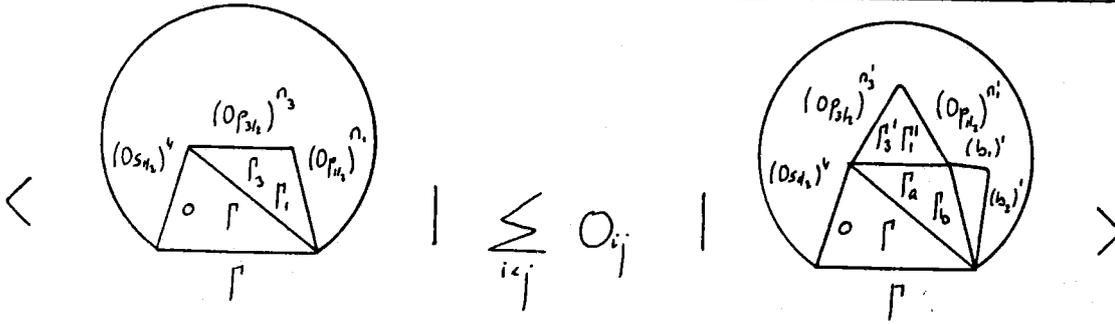
$$\times \left\langle \begin{array}{c} \sigma' \\ \theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \sigma' \\ \theta \end{array} \right\rangle$$

$$4. \left\langle \begin{array}{c} (\sigma)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ (\sigma)' \end{array} \right| \sum_{j \in \sigma} O_{ij} (1 - P_{ij}) \left| \begin{array}{c} (\sigma)' \\ \Gamma_a \Gamma_b \\ \Gamma \\ (\sigma)'' \end{array} \right\rangle$$

$$= (-1)^{\Gamma_{\sigma} + \Gamma_{\sigma'} + \Gamma_{\sigma''} - \Gamma_b - \Gamma_b'} \sum_{\theta} u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma} \Gamma_{\sigma'}; \theta \Gamma_b) \times u(\Gamma_a \Gamma_{\sigma} \Gamma_{\sigma''}; \theta \Gamma_b')$$

$$\times \left\langle \begin{array}{c} \sigma' \\ \theta \end{array} \right| O_{12} \left| \begin{array}{c} \sigma'' \\ \theta \end{array} \right\rangle$$

A.6. Elementos de matriz entre funciones de tres y cinco capas.

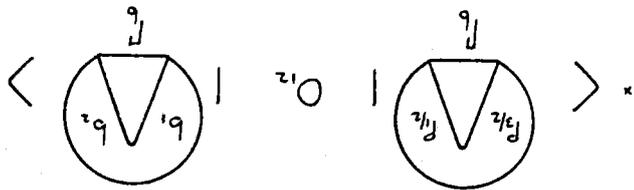


Casos:

1.  $n'_3 = n_3 - 1$   
 $n'_1 = n_1 - 1$

2.  $n'_3 = n_3 - 2$   
 $n'_1 = n_1$

3.  $n'_3 = n_3$   
 $n'_1 = n_1 - 2$

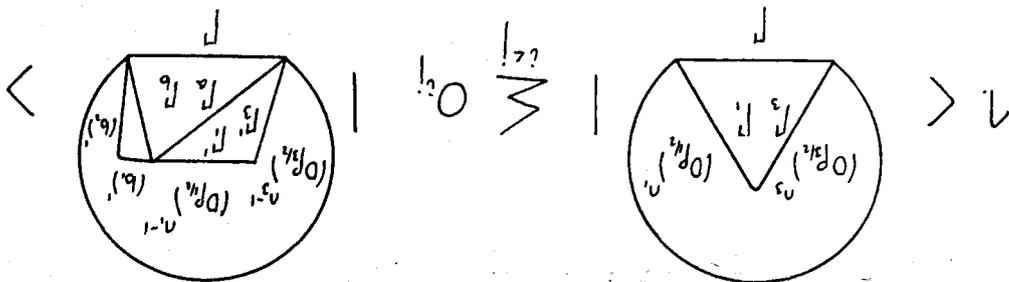


$$\cdot ( \dots ) \cdot ( \dots ) \cdot$$

$$\cdot ( \dots ) \cdot \sum_{m=-\dots}^{\dots} (-1)^{\dots}$$

$$\cdot \langle \dots \rangle \cdot \langle \dots \rangle \cdot$$

$$\cdot \sqrt{\frac{2}{1 \cdot \dots \cdot \dots}} \cdot (-1)^{\dots} =$$



$$2. \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{3/2}})^{n_3} \quad (O_{P_{1/2}})^{n_1} \\ \Gamma_3 \quad \Gamma_1 \\ \Gamma \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i < j} O_{ij} \right| \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{3/2}})^{n_3-2} \quad (O_{P_{1/2}})^{n_1} \quad (b_1)' \\ \Gamma_3' \quad \Gamma_1' \quad \Gamma_a \quad \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{\Gamma_1, \Gamma_1'} \times \sqrt{\frac{1}{2} n_3 (n_3 - 1)} \times (-1)^{\Gamma_3 + \Gamma_1 + \Gamma_3' + \Gamma_1' - \Gamma_a - \Gamma_b}$$

$$\times \left\langle (P_{3/2})^{n_3} : \Gamma_3 \mid (P_{3/2})^{n_3-2} : \Gamma_3' \left[ (P_{3/2})^2 : \Gamma_b \right] \right\rangle \times$$

$$\times U(\Gamma_1' \Gamma_3' \Gamma \Gamma_b ; \Gamma_a \Gamma_1) \times \left\langle \begin{array}{c} P_{3/2}^2 \\ \Gamma_b \end{array} \mid O_{12} \mid \begin{array}{c} b_1 \quad b_2 \\ \Gamma_b \end{array} \right\rangle$$

$$3. \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{1/2}})^{n_3} \quad (O_{P_{1/2}})^{n_1} \\ \Gamma_3 \quad \Gamma_1 \\ \Gamma \end{array} \right\rangle \left| \sum_{i < j} O_{ij} \right| \left\langle \begin{array}{c} (O_{P_{1/2}})^{n_3} \quad (O_{P_{1/2}})^{n_1-2} \quad (b_1)' \\ \Gamma_3' \quad \Gamma_1' \quad \Gamma_a \quad \Gamma_b \\ \Gamma \end{array} \right\rangle$$

$$= \int_{\Gamma_3, \Gamma_3'} \times \sqrt{\frac{1}{2} n_1 (n_1 - 1)} \times \left\langle (P_{1/2})^{n_1} : \Gamma_1 \mid (P_{1/2})^{n_1-2} : \Gamma_1' \left[ (P_{1/2})^2 : \Gamma_b \right] \right\rangle \times$$

$$\times U(\Gamma_3' \Gamma_1' \Gamma \Gamma_b ; \Gamma_a \Gamma_1) \times \left\langle \begin{array}{c} P_{1/2}^2 \\ \Gamma_b \end{array} \mid O_{12} \mid \begin{array}{c} b_1 \quad b_2 \\ \Gamma_b \end{array} \right\rangle$$

APENDICE B:

OBTENCION DEL POTENCIAL EFECTIVO.

B.0. Introducción.

B.1. Resultados previos.

B.2. Término asociado con la energía potencial.

B.3. Término asociado con la energía cinética.

B.4. Término asociado con la norma.

### B.0. Introducción.

En nuestro trabajo consideramos un potencial realista a dos cuerpos de expresión general (2.8),

$$\begin{aligned}
 V(12) = & V_c^{01}(r) P_1 P^+ + V_c^{00}(r) P_1 P^- + V_c^{10}(r) P_3 P^+ + V_c^{11}(r) P_3 P^- \\
 & + V_T^{10}(r) S_{12} P_3 P^+ + V_T^{11}(r) S_{12} P_3 P^- \\
 & + V_{ls}^{10}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^+ + V_{ls}^{11}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 P^- ,
 \end{aligned} \tag{B.1}$$

donde

$$\begin{aligned}
 S_{12} = & 3 \frac{(\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{r})(\bar{\sigma}_2 \cdot \bar{r})}{r^2} - \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 \\
 = & 6Q - 2\bar{S}^2 \\
 = & 6Q - 4P_3
 \end{aligned} \tag{B.2}$$

$$Q = \frac{(\bar{S} \cdot \bar{r})^2}{r^2} \tag{B.3}$$

$$\bar{S} = \frac{1}{2} (\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2) , \tag{B.4}$$

y un operador de correlación, también a dos cuerpos, dado según (1.19)

por

$$F_2(12) = F^+(12) P^+ + F^-(12) P^-$$

$$F^\pm(12) = f_1^\pm(r) P_1 + f_2^\pm(r) P_3 Q + f_3^\pm(r) P_3 (1-Q) , \tag{B.5}$$

donde las P representan los correspondientes operadores de proyección:  $P_1$  y  $P_3$  sobre estados singlete y triplete de espín;  $P^+$  y  $P^-$  sobre estados pares e impares del sistema de dos nucleones.

En este apéndice calcularemos la expresión de los distintos operadores efectivos

$$V_p^{\text{eff}} = F_2(12) V(12) F_2(12) \quad (\text{B.6})$$

$$V_k^{\text{eff}} = \frac{1}{2} \left[ F_2(12) \left[ T(1) + T(2), F_2(12) \right] \right] \quad (\text{B.7})$$

$$V_w^{\text{eff}} = F_2^2(12) \quad , \quad (\text{B.8})$$

necesarios en la aplicación de las correspondientes expansiones en clusters y asociados con las energías potencial y cinética los dos primeros y la norma de los estados el último de ellos.

### B.1. Resultados previos.

Los siguientes resultados son necesarios para nuestro cálculo; su obtención es laboriosa en algunos casos y sólo se incluyen los principales pasos intermedios:

$$1^{\circ}) \quad Q^2 = Q = \frac{1}{6} S_{12} + \frac{2}{3} P_3 \quad (\text{B.9})$$

$$Q = \frac{(\vec{S} \cdot \vec{r})^2}{r^2} = \frac{1}{4r^2} \left[ (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r})^2 + (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r})^2 + 2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) \right]$$

$$(\vec{\sigma} \cdot \vec{r})^2 = r^2 + xy (\sigma_x \sigma_y + \sigma_y \sigma_x) + xz (\sigma_x \sigma_z + \sigma_z \sigma_x) + yz (\sigma_y \sigma_z + \sigma_z \sigma_y) = r^2$$

$$Q = \frac{1}{2r^2} \left[ r^2 + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) \right]$$

$$Q^2 = \frac{1}{4r^4} \left[ r^4 + (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r})^2 (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r})^2 + 2r^2 (\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{r}) (\vec{\sigma}_2 \cdot \vec{r}) \right] = Q$$

$$2^{\circ}) \quad (1-Q) = (1-Q)^2 = 1 - \frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \quad (\text{B.10})$$

$$(1-Q)^2 = 1 + Q^2 - 2Q = 1 - Q$$

$$3^{\circ}) \quad Q(1-Q) = (1-Q)Q = 0 \quad (\text{B.11})$$

$$Q(1-Q) = Q^2 - Q = 0$$

$$(1-Q)Q = Q - Q^2 = 0$$

$$4^{\circ}) P_3 (1-Q)^2 = \frac{1}{3} P_3 - \frac{1}{6} S_{12} \quad (B.12)$$

$$P_3 (1-Q)^2 = P_3 - \frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3$$

$$5^{\circ}) Q S_{12} (1-Q) = (1-Q) S_{12} Q = 0 \quad (B.13)$$

$$Q S_{12} (1-Q) = Q (6Q - 4P_3) (1-Q) = 6Q^2 - 6Q^3 - 4Q + 4Q^2 = 0$$

$$(1-Q) S_{12} Q = (1-Q) (6Q - 4P_3) Q = 0$$

$$6^{\circ}) Q S_{12} Q = 2Q = \frac{1}{3} S_{12} + \frac{4}{3} P_3 \quad (B.14)$$

$$Q S_{12} Q = Q (6Q - 4P_3) Q = (6Q^2 - 4Q) Q = 2Q$$

$$7^{\circ}) (1-Q) S_{12} (1-Q) = 4Q - 4P_3 = \frac{2}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3 \quad (B.15)$$

$$(1-Q) S_{12} (1-Q) = (6Q - 4P_3 - 6Q + 4Q) (1-Q) = 4Q - 4P_3$$

$$= -4P_3 + \frac{2}{3} S_{12} + \frac{8}{3} P_3$$

$$8^{\circ}) Q \bar{L} \cdot \bar{S} Q = -Q = -\frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \quad (B.16)$$

$$Q \bar{L} \cdot \bar{S} Q = \frac{1}{8r^4} \left[ 2r^4 \bar{L} \cdot \bar{S} + 2r^2 \{ B, \bar{L} \cdot \bar{S} \} + AB \right]$$

$$\left. \begin{aligned} B &= (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{r})(\bar{\sigma}_2 \cdot \bar{r}) \\ A &= 2B \bar{L} \cdot \bar{S} \end{aligned} \right\}$$

$$\{ B, \bar{L} \cdot \bar{S} \} = B \bar{L} \cdot \bar{S} + \bar{L} \cdot \bar{S} B = 4r^2 P_3 - 6r^2 Q$$

$$\bar{L} \cdot \bar{S} B = 2\bar{S}^2 r^2 - 6r^2 Q$$

$$B \bar{L} \cdot \bar{S} = 4r^2 P_3 - 2\bar{S}^2 r^2$$

$$AB = (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{r})(\bar{\sigma}_2 \cdot \bar{r})(\bar{L} \cdot \bar{\sigma}_1 + \bar{L} \cdot \bar{\sigma}_2)(\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{r})(\bar{\sigma}_2 \cdot \bar{r})$$

$$= 4r^4 Q - 2r^4 \bar{L} \cdot \bar{S} - 8r^4 P_3$$

$$9^{\circ}) \{ Q, \bar{L} \cdot \bar{S} \} = Q \bar{L} \cdot \bar{S} + \bar{L} \cdot \bar{S} Q = 2P_3 - 3Q + \bar{L} \cdot \bar{S} = \bar{L} \cdot \bar{S} - \frac{1}{2} S_{12} \quad (B.17)$$

$$Q \bar{L} \cdot \bar{S} = \frac{1}{4r^2} (2r^2 \bar{L} \cdot \bar{S} + A) \rightarrow A = 4r^2 Q \bar{L} \cdot \bar{S} - 2r^2 \bar{L} \cdot \bar{S}$$

$$\bar{L} \cdot \bar{S} Q = \frac{1}{4r^2} (2r^2 \bar{L} \cdot \bar{S} + 2\bar{L} \cdot \bar{S} B) \rightarrow \bar{L} \cdot \bar{S} B = 2r^2 \bar{L} \cdot \bar{S} Q - r^2 \bar{L} \cdot \bar{S}$$

$$Q = \frac{1}{2r^2} (r^2 + B)$$

$$Q \bar{L} \bar{S} Q = \frac{1}{8r^4} (-4r^4 \bar{L} \bar{S} + 8r^4 \bar{L} \bar{S} Q + 4r^4 Q - 8r^4 P_3)$$

$$= \frac{1}{2} \{Q, \bar{L} \bar{S}\} - \frac{1}{2} \bar{L} \bar{S} + \frac{1}{2} Q - P_3 = -Q$$

$$\{Q, \bar{L} \bar{S}\} = 2P_3 - 3Q + \bar{L} \bar{S}$$

$$10^a) \quad Q \bar{L} \bar{S} (1-Q) + (1-Q) \bar{L} \bar{S} Q = 2P_3 - Q + \bar{L} \bar{S} = \frac{4}{3} P_3 - \frac{1}{6} S_{12} + \bar{L} \bar{S} \quad (\text{B.18})$$

$$Q \bar{L} \bar{S} (1-Q) = Q \bar{L} \bar{S} - Q \bar{L} \bar{S} Q$$

$$(1-Q) \bar{L} \bar{S} Q = \bar{L} \bar{S} Q - Q \bar{L} \bar{S} Q$$

$$Q \bar{L} \bar{S} (1-Q) + (1-Q) \bar{L} \bar{S} Q = \{Q, \bar{L} \bar{S}\} - 2Q \bar{L} \bar{S} Q$$

$$11^a) \quad (1-Q) \bar{L} \bar{S} (1-Q) = 2Q - 2P_3 = \frac{1}{3} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \quad (\text{B.19})$$

$$(1-Q) \bar{L} \bar{S} (1-Q) = \bar{L} \bar{S} - \bar{L} \bar{S} Q + Q \bar{L} \bar{S} Q \\ = \bar{L} \bar{S} - \{ \bar{L} \bar{S}, Q \} + Q \bar{L} \bar{S} Q$$

$$12^a) \quad [Q, [Q, \bar{L}^2]] = 2Q - 2\bar{L} \bar{S} - 4P_3 = \frac{1}{3} S_{12} - \frac{8}{3} P_3 - 2\bar{L} \bar{S} \quad (\text{B.20})$$

$$[Q, [Q, \bar{L}^2]] = -2[Q, [Q, \bar{L} \bar{S}]] \\ = -2 \{Q, \bar{L} \bar{S}\} + 4Q \bar{L} \bar{S} Q$$

$$13^a) \quad [f_i(r), [\nabla_r^2, f_j(r)]] = -2 (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) \quad (\text{B.21})$$

$$\nabla_r^2 = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\bar{L}^2}{r^2}$$

$$[f_i(r), [\frac{2}{r} \frac{d}{dr} - \frac{\bar{L}^2}{r^2}, f_j(r)]] = 0$$

$$14^a) \quad [f_i(r), [\nabla_r^2, f_j(r) Q]] = (-2Q) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) = (-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) \quad (\text{B.22})$$

$$[f_i(r), [\nabla_r^2, f_j(r) Q]] = [f_i(r), [\frac{d^2}{dr^2}, f_j(r) Q]] = (-2Q) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j)$$

$$15a) \left[ f_i^{(r)} Q, \left[ \nabla_r^2, f_j^{(r)} \right] \right] = (-2Q) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) = \left( -\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3 \right) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) \quad (B.23)$$

$$16a) \left[ f_i^{(r)} Q, \left[ \nabla_r^2, f_j^{(r)} Q \right] \right] = \left( -\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3 \right) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) + \frac{1}{r^2} f_i f_j \left( \frac{1}{3} S_{12} - \frac{8}{3} P_3 - 2\bar{L}\bar{S} \right) \quad (B.24)$$

$$\left[ f_i Q, \left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr}, f_j Q \right] \right] = (-2Q) (\nabla_r f_i) (\nabla_r f_j) + 0$$

$$\left[ f_i Q, \left[ -\frac{\bar{L}^2}{r^2}, f_j Q \right] \right] = \frac{1}{r^2} f_i f_j (2Q - 4P_3 - 2\bar{L}\bar{S})$$

**B.2. Término asociado con la energía potencial.**

$$V_P^{eff} = F_2^{(12)} V_{(12)} F_2^{(12)}$$

$$= \sum_{i=+, -} F^i V^i F^i P^i = V_P^{eff+} P^+ + V_P^{eff-} P^- \quad (B.25)$$

$$V_P^{effi} = \left[ f_1^i(r) P_1 + f_2^i(r) P_3 Q + f_3^i(r) P_3 (1-Q) \right] \left[ V_c^{0Ti} P_1 + V_c^{1Ti} P_3 + V_T^{1Ti} S_{12} P_3 + V_{L5}^{1Ti} \bar{L}\bar{S} P_3 \right]$$

$$\times \left[ f_1^i(r) P_1 + f_2^i(r) P_3 Q + f_3^i(r) P_3 (1-Q) \right]$$

$$= (f_1^i)^2 V_c^{0Ti} P_1 + \left[ (f_2^i)^2 V_c^{1Ti} Q^2 + f_2^i f_3^i Q (1-Q) \right]$$

$$+ (f_2^i)^2 V_T^{1Ti} Q S_{12} Q + f_2^i f_3^i V_T^{1Ti} Q S_{12} (1-Q) + (f_2^i)^2 V_{L5}^{1Ti} Q \bar{L}\bar{S} Q + f_2^i f_3^i V_{L5}^{1Ti} Q \bar{L}\bar{S} (1-Q)$$

$$+ f_3^i f_2^i V_c^{1Ti} (1-Q) Q + (f_3^i)^2 V_c^{1Ti} (1-Q)^2 + f_3^i f_2^i V_T^{1Ti} (1-Q) S_{12} Q + (f_3^i)^2 V_T^{1Ti} (1-Q) S_{12} (1-Q)$$

$$+ f_3^i f_2^i V_{L5}^{1Ti} (1-Q) \bar{L}\bar{S} Q + (f_3^i)^2 V_{L5}^{1Ti} (1-Q) \bar{L}\bar{S} (1-Q) \Big] P_3$$

$$= (f_1^i)^2 V_c^{0Ti} P_1 + \left[ (f_3^i)^2 V_T^{1Ti} \left( \frac{2}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3 \right) + (f_3^i)^2 V_{L5}^{1Ti} \left( \frac{1}{3} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \right) \right]$$

$$+ (f_2^i)^2 V_c^{1Ti} \left( \frac{1}{6} S_{12} + \frac{2}{3} P_3 \right) + (f_2^i)^2 V_T^{1Ti} \left( \frac{1}{3} S_{12} + \frac{4}{3} P_3 \right) + (f_2^i)^2 V_{L5}^{1Ti} \left( -\frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \right)$$

$$+ f_2^i f_3^i V_{L5}^{1Ti} \left( -\frac{1}{6} S_{12} + \frac{4}{3} P_3 + \bar{L}\bar{S} \right) + (f_3^i)^2 V_c^{1Ti} \left( 1 - \frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \right) \Big] P_3$$

$$\begin{aligned}
&= (f_1^i)^2 V_c^{0T_i} P_1 + \left[ \frac{2}{3} (f_2^i)^2 V_c^{1T_i} + \frac{4}{3} (f_2^i)^2 V_T^{1T_i} - \frac{2}{3} (f_2^i)^2 V_{L_S}^{1T_i} \right. \\
&\quad \left. + \frac{4}{3} f_2^i f_3^i V_{L_S}^{1T_i} + \frac{1}{3} (f_3^i)^2 V_c^{1T_i} - \frac{4}{3} (f_3^i)^2 V_T^{1T_i} - \frac{2}{3} (f_3^i)^2 V_{L_S}^{1T_i} \right] P_3 \\
&\quad + \left[ \frac{1}{6} (f_1^i)^2 V_c^{1T_i} + \frac{1}{3} (f_2^i)^2 V_T^{1T_i} - \frac{1}{6} (f_2^i)^2 V_{L_S}^{1T_i} - \frac{1}{6} f_2^i f_3^i V_{L_S}^{1T_i} \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{6} (f_3^i)^2 V_c^{1T_i} + \frac{2}{3} (f_3^i)^2 V_T^{1T_i} + \frac{1}{3} (f_3^i)^2 V_{L_S}^{1T_i} \right] S_{12} P_3 + \left[ f_2^i f_3^i V_{L_S}^{1T_i} \right] \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 \\
&= (f_1^i)^2 V_c^{0T_i} P_1 + \left[ \left( \frac{2}{3} V_c^{1T_i} + \frac{4}{3} V_T^{1T_i} - \frac{2}{3} V_{L_S}^{1T_i} \right) (f_2^i)^2 \right. \\
&\quad \left. + \left( \frac{1}{3} V_c^{1T_i} - \frac{4}{3} V_T^{1T_i} - \frac{2}{3} V_{L_S}^{1T_i} \right) (f_3^i)^2 + \frac{4}{3} V_{L_S}^{1T_i} f_2^i f_3^i \right] P_3 \\
&\quad + \left[ \left( \frac{1}{6} V_c^{1T_i} + \frac{1}{3} V_T^{1T_i} - \frac{1}{6} V_{L_S}^{1T_i} \right) (f_2^i)^2 + \left( -\frac{1}{6} V_c^{1T_i} + \frac{2}{3} V_T^{1T_i} + \frac{1}{3} V_{L_S}^{1T_i} \right) (f_3^i)^2 \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{6} V_{L_S}^{1T_i} f_2^i f_3^i \right] S_{12} P_3 + f_2^i f_3^i V_{L_S}^{1T_i} \bar{L} \cdot \bar{S} P_3 \quad , \quad i = +, - , \\
&\hspace{20em} (8.26)
\end{aligned}$$

donde  $v^{ST+} = v^{10}, v^{01}$ ;  $v^{ST-} = v^{11}, v^{00}$ .

### B.3. Término asociado con la energía cinética.

$$\begin{aligned}
V_K^{eff} &= \frac{1}{2} \left[ F_2(12), [T(1) + T(2), F_2(12)] \right] \\
&= \frac{1}{2} \left[ F_2(12), \left[ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_r^2, F_2(12) \right] \right] \\
&= \sum_{i=+, -} \frac{1}{2} \left[ F^i(12), \left[ -\frac{\hbar^2}{m} \nabla_r^2, F^i(12) \right] \right] P^i = V_K^{eff+} P^+ + V_K^{eff-} P^- \\
&\hspace{20em} (8.27)
\end{aligned}$$

$$V_K^{effi} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ f_1^i P_1 + f_2^i Q P_3 + f_3^i (1-Q) P_3, \left[ \nabla_r^2, f_1^i P_1 + f_2^i Q P_3 + f_3^i (1-Q) P_3 \right] \right]$$

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left\{ [f_1^i, [\nabla_r^2, f_1^i]] P_1 + ([f_1^i Q, [\nabla_r^2, f_1^i Q]] + [f_1^i Q, [\nabla_r^2, f_1^i]]) \right. \\
&\quad - [f_2^i Q, [\nabla_r^2, f_1^i Q]] + [f_2^i, [\nabla_r^2, f_1^i Q]] + [f_2^i, [\nabla_r^2, f_1^i]] \\
&\quad \left. - [f_3^i, [\nabla_r^2, f_1^i Q]] - [f_3^i, [\nabla_r^2, f_2^i Q]] - [f_3^i Q, [\nabla_r^2, f_1^i]] + [f_3^i Q, [\nabla_r^2, f_1^i Q]] \right\} P_3 \\
&= -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \left\{ -2 (\nabla_r f_1^i)^2 P_1 \right.
\end{aligned}$$

$$+ \left[ \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_2^i)^2 + \frac{1}{r^2} (f_2^i)^2 \left(\frac{1}{3} S_{12} - \frac{8}{3} P_3 - 2\bar{L}\bar{S}\right) \right]$$

$$+ \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_2^i) (\nabla_r f_3^i)$$

$$- \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_2^i) (\nabla_r f_3^i) - \frac{1}{r^2} f_2^i f_3^i \left(\frac{1}{3} S_{12} - \frac{8}{3} P_3 - 2\bar{L}\bar{S}\right)$$

$$+ \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_2^i) (\nabla_r f_3^i) - 2 (\nabla_r f_3^i)^2$$

$$- \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_3^i)^2$$

$$- \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_2^i) (\nabla_r f_3^i) - \frac{1}{r^2} f_2^i f_3^i \left(\frac{1}{3} S_{12} - \frac{8}{3} P_3 - 2\bar{L}\bar{S}\right)$$

$$- \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_3^i)^2$$

$$+ \left(-\frac{1}{3} S_{12} - \frac{4}{3} P_3\right) (\nabla_r f_3^i)^2 + \frac{1}{r^2} (f_3^i)^2 \left(\frac{1}{3} S_{12} - \frac{8}{3} P_3 - 2\bar{L}\bar{S}\right) \Big] P_3 \Big\}$$

$$= \frac{\hbar^2}{m} (\nabla_r f_1^i)^2 P_1$$

(B.28)

$$+ \left\{ \left[ \frac{4}{3} (f_2^i)^2 + \frac{4}{3} (f_3^i)^2 - \frac{8}{3} f_2^i f_3^i \right] \frac{1}{r^2} + \frac{2}{3} (\nabla_r f_2^i)^2 + \frac{1}{3} (\nabla_r f_3^i)^2 \right\} \frac{\hbar^2}{m} P_3$$

$$+ \left\{ \left[ -\frac{1}{6} (f_2^i)^2 - \frac{1}{6} (f_3^i)^2 + \frac{1}{3} f_2^i f_3^i \right] \frac{1}{r^2} + \frac{1}{6} (\nabla_r f_2^i)^2 - \frac{1}{6} (\nabla_r f_3^i)^2 \right\} \frac{\hbar^2}{m} S_{12} P_3$$

$$+ \left\{ (f_2^i)^2 + (f_3^i)^2 - 2 f_2^i f_3^i \right\} \frac{1}{r^2} \frac{\hbar^2}{m} \bar{L}\bar{S} P_3, \quad i = +, -$$

B.4. Término asociado con la norma.

$$\begin{aligned}
 V_N^{\text{eff}} &= F_2^2(12) \\
 &= \sum_{i=+,-} F_i^2(12) P^i = V_N^{\text{eff}+} P^+ + V_N^{\text{eff}-} P^- \quad (B.29)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_N^{\text{eff}i} &= \left[ f_1^i(r) P_1 + f_2^i(r) Q P_3 + f_3^i(r) (1-Q) P_3 \right]^2 \\
 &= (f_1^i)^2 P_1 \\
 &\quad + \left[ (f_2^i)^2 Q^2 + f_2^i f_3^i Q(1-Q) + f_3^i f_2^i (1-Q) Q + (f_3^i)^2 (1-Q)^2 \right] P_3 \\
 &= (f_1^i)^2 P_1 \\
 &\quad + (f_2^i)^2 \left( \frac{1}{6} S_{12} + \frac{2}{3} P_3 \right) P_3 \\
 &\quad + (f_3^i)^2 \left( 1 - \frac{1}{6} S_{12} - \frac{2}{3} P_3 \right) P_3 \\
 &= (f_1^i)^2 P_1 \\
 &\quad + \left[ \frac{2}{3} (f_2^i)^2 + \frac{1}{3} (f_3^i)^2 \right] P_3 \\
 &\quad + \left[ \frac{1}{6} (f_2^i)^2 - \frac{1}{6} (f_3^i)^2 \right] S_{12} P_3, \quad i = +, - \quad (B.30)
 \end{aligned}$$

APENDICE C:

ELEMENTOS DE MATRIZ DE DOS CUERPOS.

C.1. Estados antisimétricos de dos partículas.

C.2. Valor esperado del potencial efectivo entre los estados antisimétricos de dos partículas.

C.2.0. Introducción.

C.2.1. Componentes centrales.

C.2.2. Componentes tensoriales.

C.2.3. Componentes espín-órbita.

C.1. Estados antisimétricos de dos partículas.

En este apartado obtendremos las restricciones que deberán cumplir los números cuánticos asociados a cada estado antisimétrico de dos partículas.

Consideremos, pues, el estado antisimétrico

$$| \begin{array}{c} \textcircled{0,0} \\ \triangle \\ n_1, l_1, j_1 \quad n_2, l_2, j_2 \\ \text{JT} \end{array} \rangle, \quad (C.1)$$

según notación gráfica ya introducida anteriormente (ver apartado 3 de esta memoria), que vendrá dado por

$$| \begin{array}{c} \textcircled{0,0} \\ \triangle \\ n_1, l_1, j_1 \quad n_2, l_2, j_2 \\ \text{JT} \end{array} \rangle = \frac{1 - P_{12}}{\sqrt{2(1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2})}} \times | \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ \triangle \\ n_1, l_1, j_1 \quad n_2, l_2, j_2 \\ \text{JT} \end{array} \rangle, \quad (C.2)$$

siendo  $P_{12}$  la correspondiente permutación sobre las dos partículas. Para cada estado antisimétrico de dos partículas es conocido el requisito  $J+T$  impar que se debe satisfacer si las dos partículas se encuentran en la misma capa.

Pretendemos aquí establecer qué restricción habrá de satisfacerse una vez aplicada la transformación de Brody-Moshinsky al anterior estado, como consecuencia de su antisimetría. Para ello estudiemos la acción del operador  $P_{12}$  sobre el estado de dos partículas acopladas a momentos angulares total  $J$  y de isoespín  $T$ :

$$P_{12} | \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ \triangle \\ n_1, l_1, j_1 \quad n_2, l_2, j_1 \\ \text{JT} \end{array} \rangle = P_{12} | \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ \triangle \\ n_1, l_1, j_1 \quad n_2, l_2, j_1 \\ J \end{array} \rangle \otimes | \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ \triangle \\ 1/2 \quad 1/2 \\ T \end{array} \rangle, \quad (C.3)$$

simbolizando  $\otimes$  el correspondiente producto directo,

$$\begin{aligned}
 &= \left| \begin{array}{c} \textcircled{2} \quad \textcircled{1} \\ n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \otimes \left| \begin{array}{c} \textcircled{2} \quad \textcircled{1} \\ 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \right\rangle \\
 &= (-1)^{|i_1+i_2-J+\frac{1}{2}+\frac{1}{2}-T|} \times \left| \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ n_2 l_2 j_2 \quad n_1 l_1 j_1 \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \otimes \left| \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \right\rangle \\
 &= (-1)^{|i_1+i_2+1-J-T|} \times \left| \begin{array}{c} 1/2 \quad n, l_1 \\ n_2 l_2 \quad i_1 j_1 \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \otimes \left| \begin{array}{c} 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \right\rangle \\
 &= (-1)^{|i_1+i_2+1-J-T|} \times \sum_{\lambda S} U \begin{pmatrix} l_2 & 1/2 & j_2 \\ l_1 & 1/2 & j_1 \\ \lambda & S & J \end{pmatrix} \times \left| \begin{array}{c} n, l_1 \quad 1/2 \\ n_2 l_2 \quad i_1 j_1 \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \otimes \left| \begin{array}{c} 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \right\rangle,
 \end{aligned}$$

donde

$$U \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \sqrt{(2c+1)(2f+1)(2g+1)(2h+1)} \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix}, \quad (C.4)$$

y representando el último símbolo los usuales coeficientes 9-j (BRU77, LAW80),

$$= (-1)^{|i_1+i_2+1-J-T|} \times \sum_{\substack{\lambda S \\ n \in NL}} U \begin{pmatrix} l_2 & 1/2 & j_2 \\ l_1 & 1/2 & j_1 \\ \lambda & S & J \end{pmatrix} \times M_\lambda(n \in NL, n_2 l_2, n_1 l_1) \times \left| \begin{array}{c} NL \quad 1/2 \\ n l_1 \quad i_1 j_1 \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \otimes \left| \begin{array}{c} 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \right\rangle, \quad (C.5)$$

simbolizando  $M_\lambda$  el correspondiente coeficiente de Brody-Moshinsky,

$$= (-1)^{|i_1+i_2+1-J-T|} \times \sum_{\substack{\lambda S \\ n \in NL \\ i}} U \begin{pmatrix} l_2 & 1/2 & j_2 \\ l_1 & 1/2 & j_1 \\ \lambda & S & J \end{pmatrix} \times M_\lambda(n \in NL, n_2 l_2, n_1 l_1) \times U \begin{pmatrix} l & L & \lambda \\ S & O & S \\ i & L & J \end{pmatrix} \times \left| \begin{array}{c} S \\ n l_1 \quad i \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \otimes \left| \begin{array}{c} 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \right\rangle. \quad (C.6)$$

Alternativamente podemos obtener también:

$$\begin{aligned}
 P_{12} & | \begin{array}{c} \textcircled{1} \quad \textcircled{2} \\ n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \triangle \\ J T \end{array} \rangle \\
 &= P_{12} \sum_{\substack{\lambda S \\ n \in NL \\ i}} U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & S & J \end{Bmatrix} \cdot M_\lambda(n \ell NL, n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot U \begin{Bmatrix} \ell & L & \lambda \\ S & O & S \\ j & L & J \end{Bmatrix} \cdot | \begin{array}{c} S \\ n \ell \triangle NL \\ j \\ J \end{array} \rangle \otimes | \begin{array}{c} 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \rangle, \quad (C.7)
 \end{aligned}$$

de manera que ambas expresiones (C.6) y (C.7) han de ser idénticas, o sea,

$$\begin{aligned}
 P_{12} & \sum_{\substack{\lambda S \\ n \in NL \\ i}} U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & S & J \end{Bmatrix} \cdot M_\lambda(n \ell NL, n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot U \begin{Bmatrix} \ell & L & \lambda \\ S & O & S \\ j & L & J \end{Bmatrix} \cdot | n \ell s, j; NL; JT \rangle \\
 &= (-1)^{i+1/2+1-J-T} \sum_{\substack{\lambda S \\ n \in NL \\ i}} U \begin{Bmatrix} l_2 & 1/2 & j_2 \\ l_1 & 1/2 & j_1 \\ \lambda & S & J \end{Bmatrix} \cdot M_\lambda(n \ell NL, n_2 l_2 n_1 l_1) \cdot U \begin{Bmatrix} \ell & L & \lambda \\ S & O & S \\ i & L & J \end{Bmatrix} \cdot | n \ell s, j; NL; JT \rangle, \quad (C.8)
 \end{aligned}$$

donde se ha introducido la notación

$$| n \ell s, j; NL; JT \rangle \equiv | \begin{array}{c} S \\ n \ell \triangle NL \\ j \\ J \end{array} \rangle \otimes | \begin{array}{c} 1/2 \quad 1/2 \\ \triangle \\ T \end{array} \rangle. \quad (C.9)$$

Si ahora aplicamos las relaciones de simetría

$$\begin{aligned}
 M_\lambda(n \ell NL, n_1 l_1 n_2 l_2) &= (-1)^{L-\lambda} \cdot M_\lambda(n \ell NL, n_2 l_2 n_1 l_1) \\
 U \begin{Bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{Bmatrix} &= (-1)^{a+b+c+d+e+f+g+h+i} \cdot U \begin{Bmatrix} d & e & f \\ a & b & c \\ g & h & i \end{Bmatrix} \quad (C.10)
 \end{aligned}$$

de los coeficientes de Brody-Moshinsky y 9-j, llegamos al resultado

$$P_{12} | n \ell s, j; NL; JT \rangle = (-1)^{i+1/2+1-J-T+L-\lambda+l_1+l_2+1+j_1+j_2+\lambda+S+J} \cdot | n \ell s, j; NL; JT \rangle \quad (C.11)$$

y, por tanto, puesto que la función es antisimétrica necesariamente habrá de tenerse

$$L + l_1 + l_2 + S + T \text{ impar} \quad (\text{C.12})$$

para cada uno de los posibles conjuntos de valores de estos números cuánticos.

Por conservación de la paridad, necesariamente

$$(-1)^{l_1+l_2} = (-1)^{l+L} \quad (\text{C.13})$$

y, en consecuencia llegamos a la restricción

$$l + S + T \text{ impar} \quad (\text{C.14})$$

para cada estado antisimétrico de dos partículas, estén o no en la misma capa:

"La suma del momento orbital relativo  $l$ , el momento de espín  $S$  y el de isoespín  $T$  debe ser siempre un número impar para cada estado antisimétrico de dos partículas".

## C.2. Valor esperado del potencial efectivo entre los estados antisimétricos de dos partículas.

### C.2.0. Introducción.

En este apartado obtendremos las expresiones de los valores esperados del potencial efectivo entre los estados antisimétricos de dos partículas

$$\langle n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2; JT | V^{eff}_{(12)} | n_3 l_3 j_3, n_4 l_4 j_4; JT \rangle_A \quad (\text{C.15})$$

donde

$$| n_1 l_1 j_1, n_2 l_2 j_2; JT \rangle_A \equiv \left| \begin{array}{c} \textcircled{\ominus} \textcircled{\otimes} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \quad (\text{C.16})$$

Según hemos visto en el anterior apartado de este apéndice, estas funciones se pueden expresar como

$$|n, l, j, n_2, l_2, j_2; JT\rangle_A = \frac{1 - P_{12}}{\sqrt{2(1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2})}} \sum_{\substack{\lambda S T \\ n \in NL}} U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & S & J \end{Bmatrix} \cdot M_{\lambda}(n \in NL, n, l, n_2, l_2) \cdot U \begin{Bmatrix} l & L & \lambda \\ S & O & S \\ i & L & J \end{Bmatrix} \cdot |n l s, j, NL; JT\rangle, \quad (C.17)$$

representando el último estado la función

$$|n l s, j, NL; JT\rangle \equiv |n l \begin{array}{c} S \\ \triangle \\ j \end{array} \begin{array}{c} NL \\ \triangle \\ T \end{array} \rangle \otimes | \begin{array}{c} 1/2 \\ \triangle \\ 1/2 \end{array} \rangle. \quad (C.18)$$

Si aplicamos este resultado, obtenemos para cada componente del potencial efectivo

$$V^{eff} = \sum_{S, T=0,1} V_c^{eff ST}(r) P^{ST} + \sum_{T=0,1} [V_{L_s}^{eff IT}(r) P^{IT} S_2 + V_T^{eff IT}(r) P^{IT} \bar{L} \cdot \bar{S}], \quad (C.19)$$

donde  $P^{ST}$  simboliza el proyector sobre el estado de espín S e isoespín T:

C.2.1. Componentes centrales.

$$\begin{aligned} \Delta_c &= \left\langle \begin{array}{c} n_1, l_1, j_1 \\ \triangle \\ J_1 \end{array} \begin{array}{c} n_2, l_2, j_2 \\ \triangle \\ J_2 \end{array} \middle| V_c^{eff ST}(r) P^{ST} \middle| \begin{array}{c} n_3, l_3, j_3 \\ \triangle \\ J_3 \end{array} \begin{array}{c} n_4, l_4, j_4 \\ \triangle \\ J_4 \end{array} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3, n_4} \delta_{l_3, l_4} \delta_{j_3, j_4}}} \cdot \sum_{\substack{\lambda \lambda' S' S'' \\ n' \in NL \\ n \in NL}} U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & S' & J \end{Bmatrix} \cdot U \begin{Bmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda' & S'' & J \end{Bmatrix} \cdot M_{\lambda'}(n' \in NL, n, l, n_2, l_2). \quad (C.20) \\ &= \sum_{j_1 j_2} M_{\lambda'}(n \in NL, n_3, l_3, n_4, l_4) \cdot \sum_{j_1'} U \begin{Bmatrix} l' & L' & \lambda' \\ S' & O & S' \\ j_1' & L & J \end{Bmatrix} \cdot U \begin{Bmatrix} l & L & \lambda \\ S'' & O & S'' \\ j_1 & L & J \end{Bmatrix} \cdot \left\langle \begin{array}{c} S' \\ \triangle \\ j_1' \end{array} \begin{array}{c} N'L' \\ \triangle \\ J \end{array} \middle| V_c^{eff ST} P^{ST} \middle| \begin{array}{c} S'' \\ \triangle \\ j_1 \end{array} \begin{array}{c} N'L \\ \triangle \\ J \end{array} \right\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2}}} \times \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3, n_4} \delta_{l_3, l_4} \delta_{j_3, j_4}}} \\
&\times \sum_{\substack{\lambda \lambda' s' s'' \\ n' l' N' L' \\ n l N L}} U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda' & s' & J \end{Bmatrix} \times U \begin{Bmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & s'' & J \end{Bmatrix} \times M_{\lambda'}(n' l' N' L'; n_1 l_1 n_2 l_2) \times M_{\lambda}(n l N L; n_3 l_3 n_4 l_4) \\
&\times \sum_{\parallel} U \begin{Bmatrix} l' & L & \lambda' \\ s' & 0 & s' \\ i' & L & J \end{Bmatrix} \times U \begin{Bmatrix} l & L & \lambda \\ s'' & 0 & s'' \\ j & L & J \end{Bmatrix} \times \sum_{\substack{m_1' m_1 \\ m_2' m_2}} C(j' L J; m_1' m_2') \times C(j L J; m_1 m_2) \\
&\times \int_{N', N} \int_{L', L} \int_{j_1', j_1} \int_{m_1', m_1} \int_{m_2', m_2} \langle n' l' s'; j_1 | V_c^{\text{eff}ST} P^{ST} | n l s''; j \rangle, \tag{C.21}
\end{aligned}$$

donde hemos representado mediante  $|n l s; j\rangle$  el estado relativo

$$\left| \begin{array}{c} n l \\ \triangle s \\ i \end{array} \right\rangle. \tag{C.22}$$

Puesto que se tiene la relación de ortogonalidad

$$\sum_{m_1} C(j_1 j_2 j; m_1 m_2) \times C(j_1 j_2 j'; m_1 m_2) = \delta_{j_1, j'} \tag{C.23}$$

de los coeficientes de Clebsch-Gordan, podemos escribir

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2}}} \times \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3, n_4} \delta_{l_3, l_4} \delta_{j_3, j_4}}} \\
&\times \sum U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda' & s' & J \end{Bmatrix} \times U \begin{Bmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & s'' & J \end{Bmatrix} \times M_{\lambda'}(n' l' N L; n_1 l_1 n_2 l_2) \times M_{\lambda}(n l N L; n_3 l_3 n_4 l_4) \\
&\times \sum U \begin{Bmatrix} l' & L & \lambda' \\ s' & 0 & s' \\ i & L & J \end{Bmatrix} \times U \begin{Bmatrix} l & L & \lambda \\ s'' & 0 & s'' \\ j & L & J \end{Bmatrix} \times \sum C(l' s' j; m_1' m_2') \times C(l s'' j; m_1 m_2) \\
&\times \int_{l', l} \int_{m_1', m_1} \int_{s', s} \int_{s'', s} \int_{m_2', m_2} \int_0^{\infty} R_{n'l}(r) R_{n l}(r) V_c^{\text{eff}ST}(r) r^2 dr. \tag{C.24}
\end{aligned}$$

Esta última expresión es fácilmente simplificable si aplicamos los resultados

$$\sum_{m_e m_s} c^2(l s j; m_e m_s) = 1 \quad (C.25)$$

$$\sum_i U \begin{pmatrix} l & L & \lambda \\ s & 0 & s \\ i & L & J \end{pmatrix} \cdot U \begin{pmatrix} l' & L & \lambda' \\ s & 0 & s \\ i & L & J \end{pmatrix} = (-1)^{\lambda+\lambda'} \sum_i U(L l J s; \lambda_j) \cdot U(L l' J s; \lambda'_j), \quad (C.26)$$

obtenido este último a partir de la expresión de los coeficientes 9-j que contienen un momento angular nulo en función de los usuales coeficientes de Racah

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{a+e-c-g} \cdot \frac{W(a b d e; c g)}{\sqrt{(2c+1) \cdot (2g+1)}} \cdot \int_{c,f} \cdot \int_{g,h} \quad (C.27)$$

usando la relación de simetría

$$\begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & c & b \\ g & i & h \\ d & f & e \end{pmatrix} \quad (C.28)$$

y representando  $U(a, b, c, d; e, f)$  los coeficientes normalizados de Racah,

$$U(a b c d; e f) = \sqrt{(2e+1) \cdot (2f+1)} \cdot W(a b c d; e f). \quad (C.29)$$

Además se tiene

$$\sum_i U(L l J s; \lambda_j) U(L l' J s; \lambda'_j) = \int_{\lambda', \lambda} \quad (C.30)$$

resultado obtenido aplicando la relación de simetría

$$W(a b c d; e f) = W(a c b d; f e) \quad (C.31)$$

conjuntamente con la regla de unitariedad de los coeficientes de Racah,

$$\sum_e (2e+1)(2f+1) W(a b c d; e f) W(a b c d; e g) = \int_{f,g} \quad (C.32)$$

Introduciendo todos estos resultados en (C.24) obtenemos finalmente la expresión

$$\begin{aligned}
 \Delta_c &= \left\langle \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{JT} \end{array} \middle| V_c^{\text{eff}ST}(r) P^{ST} \middle| \begin{array}{c} \text{Diagram 2} \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \\
 &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1, n_1} \delta_{l_1, l_1} \delta_{j_1, j_1}}} \times \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3, n_3} \delta_{l_3, l_3} \delta_{j_3, j_3}}} \times \sum U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & S & J \end{Bmatrix} \cdot U \begin{Bmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & S & J \end{Bmatrix} \\
 &\quad \times M_\lambda(n'lNL; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_\lambda(nlNL; n_3 l_3 n_4 l_4) \times \int_0^\infty R_{n'l}(r) R_{nl}(r) V_c^{\text{eff}ST}(r) r^2 dr, \quad (\text{C.33})
 \end{aligned}$$

en la cual recordemos que, según el resultado encontrado en el apéndice C.1,  $l$  toma valores tales que  $l+S+T$  se mantenga siempre impar. Además se han de satisfacer las dos condiciones

$$\begin{aligned}
 2n_1 + 2n_2 + l_1 + l_2 &= 2n' + 2N + l + L \\
 2n_3 + 2n_4 + l_3 + l_4 &= 2n + 2N + l + L, \quad (\text{C.34})
 \end{aligned}$$

provenientes de la conservación del número de cuantos en la transformación de Brody-Moshinsky. Obsérvese que si los dos estados de partida en la derecha e izquierda del elemento de matriz poseen el mismo número de cuantos, necesariamente habrá de ser  $n = n'$ :

$$2n_1 + 2n_2 + l_1 + l_2 = 2n_3 + 2n_4 + l_3 + l_4 \Rightarrow n' = n. \quad (\text{C.35})$$

### C.2.2. Componentes tensoriales.

Para obtener las fórmulas válidas para este tipo de componentes necesitamos calcular el valor esperado del operador tensorial  $S_{12}$ ,

ya definido como

$$S_{12} = 3 \frac{(\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{r})(\bar{\sigma}_2 \cdot \bar{r})}{r^2} - \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 \quad (C.36)$$

entre los estados relativos que hemos notado  $|n1Sj\rangle$ .

Para ello vamos primero a expresar  $S_{12}$  de una forma que nos facilite el cálculo de su valor esperado.

Si construimos a partir del vector de coordenadas  $\bar{r}$ , de componentes cartesianas

$$\left. \begin{aligned} x &= r \cos \theta \sin \varphi \\ y &= r \cos \theta \cos \varphi \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} \right\} \quad (C.37)$$

el tensor irreducible de rango uno  $r_{lm}$  de componentes

$$\left. \begin{aligned} r_{10} &= z \\ r_{1\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (x \pm iy) \end{aligned} \right\} \quad (C.38)$$

y comparamos con la expresión de los armónicos esféricos  $Y_{lm}(\theta, \varphi)$  obtenidos a partir de su definición general

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{(-1)^{l+m}}{(2l)!!} \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{1/2} (\sin \theta)^m e^{im\varphi} \frac{d^{l+m}(\sin^2 \theta)}{d(\cos \theta)^{l+m}} \quad (C.39)$$

como

$$\begin{aligned} Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta \\ Y_{11} &= -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{i\varphi} \\ Y_{1-1} &= \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi} \end{aligned} \quad (C.40)$$

obtendremos directamente el resultado

$$r_{lm} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{lm} \quad (C.41)$$

En efecto:

$$\left. \begin{aligned} r_{10} &= r \cos \theta = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{10} \\ r_{11} &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (r \sin \theta \cos \varphi + i r \sin \theta \sin \varphi) = -\frac{r}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{i\varphi} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{11} \\ r_{1-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (r \sin \theta \cos \varphi - i r \sin \theta \sin \varphi) = \frac{r}{\sqrt{2}} \sin \theta e^{-i\varphi} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} Y_{1-1} \end{aligned} \right\} \quad (C.42)$$

Si consideramos también a partir del operador vectorial  $\vec{\sigma}$  el tensor irreducible de rango uno  $\sigma_m$  de componentes

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{10} &= \sigma_z \\ \sigma_{1\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_x \pm i \sigma_y) \end{aligned} \right\}, \quad (C.43)$$

podremos expresar cada producto  $\{\vec{\sigma} \cdot \vec{r}\}$  según

$$\vec{\sigma} \cdot \vec{r} = r \sqrt{\frac{4\pi}{3}} \sum_m (-1)^m \sigma_m Y_{1-m}(\theta, \varphi), \quad (C.44)$$

ya que se tiene

$$\left. \begin{aligned} X &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (r_{11} - r_{1-1}) \\ Y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (r_{11} + r_{1-1}) \\ Z &= r_{10} \end{aligned} \right\} \quad \left. \begin{aligned} \sigma_x &= -\frac{1}{\sqrt{2}} (\sigma_1 - \sigma_{-1}) \\ \sigma_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\sigma_1 + \sigma_{-1}) \\ \sigma_z &= \sigma_0 \end{aligned} \right\} \quad (C.45)$$

y, por tanto,

$$\begin{aligned} \vec{\sigma} \cdot \vec{r} &= \sigma_x X + \sigma_y Y + \sigma_z Z \\ &= \sigma_0 r_{10} - \sigma_1 r_{1-1} - \sigma_{-1} r_{11} \end{aligned} \quad (C.46)$$

Obsérvese que hemos introducido la notación

$$\sigma_m \equiv \sigma_{1m} \quad (C.47)$$

a fin de evitar errores cuando posteriormente introduzcamos los subíndices 1 y 2 indicativos de partícula.

Aplicando estos resultados en la expresión de  $S_{12}$  obtenemos

$$S_{12} + \sigma_1 \cdot \sigma_2 = 4\pi \sum_{m m'} (-1)^{m+m'} \sigma_{1m} \sigma_{2m'} Y_{1-m} Y_{1-m'} \quad (C.48)$$

donde, como ya se ha dicho,  $\sigma_{1m}$  representa la componente  $\sigma_{1m}$  del tensor

asociado con el operador vectorial  $\bar{\sigma}_i$  de la partícula  $i$ ,  $i=1,2$ .

Si ahora aplicamos la ecuación de acoplamiento de dos armónicos esféricos definidos en el mismo espacio,

$$Y_{\ell, m}(\theta, \varphi) Y_{\ell, m'}(\theta, \varphi) = \sum_{\ell} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(2\ell'+1)}{4\pi(2\ell+1)}} C(\ell, \ell, \ell; m, m') C(\ell, \ell, \ell; 0, 0) Y_{\ell, m+m'}(\theta, \varphi),$$

se tendrá (C.49)

$$S_{12} + \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 = 3\sqrt{4\pi} \sum_{\ell m m'} (-1)^{m+m'} \sigma_{1m} \sigma_{2m} \frac{C(11\ell; -m, -m') C(11\ell; 0, 0)}{\sqrt{2\ell+1}} Y_{\ell, -m-m'}(\theta, \varphi)$$
(C.50)

y, definiendo el operador de espín resultante del acoplamiento de  $\bar{\sigma}_1$  y  $\bar{\sigma}_2$ ,

$$\bar{\sigma}_{S, m_s} = \sum_{m_r m_r'} C(11s; m_r, m_r') \sigma_{1m_r} \sigma_{2m_r'} ,$$
(C.51)

y haciendo uso de las propiedades de los coeficientes de Clebsch-Gordan

$$C(j_1 j_2 j; m_1, m_2) = (-1)^{j_1+j_2-j} C(j_2 j_1 j; -m_1, -m_2)$$
(C.52)

$$\sum_{m_1, m_2} C(j_1 j_2 j; m_1, m_2) C(j_1 j_2 j'; m_1, m_2) = \delta_{jj'}$$
(C.53)

llegamos al resultado

$$S_{12} + \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 = 3\sqrt{4\pi} \sum_{\ell} (-1)^{\ell} \frac{1}{\sqrt{2\ell+1}} C(11\ell; 0, 0) \delta_{\ell 0} Y_{\ell 0} .$$
(C.54)

Efectuando la suma, obtenemos finalmente

$$S_{12} = \sqrt{24\pi} [\sigma_2 \times Y_2]_{00} ,$$
(C.55)

donde

$$[\sigma_2 \times Y_2] = \sum C(22\ell; m_\sigma, m_\ell - m_\sigma) \sigma_{2m_\sigma} Y_{2, m_\ell - m_\sigma}$$
(C.56)

$$[\sigma_2 \times Y_2]_{00} = C(220; 0, 0) \sigma_{20} Y_{20} ,$$
(C.57)

habiéndose usado los valores

$$C(220; 0, 0) = \sqrt{1/5}$$

$$C(11\ell; 0, 0) = \begin{cases} = 0 & \text{si } \ell=1 \\ = \sqrt{2/3} & \text{si } \ell=2 \\ = -\sqrt{1/3} & \text{si } \ell=0 \end{cases} .$$
(C.58)

Hemos de calcular por tanto

$$\begin{aligned}
 \Delta_t &= \langle n' l' s'; j | V_T^{eff ST}(r) S_{12} P^{ST} | n l s''; j \rangle \\
 &= \langle \begin{array}{c} n' l' s' \\ \downarrow \\ i \end{array} | V_T^{eff ST}(r) \sqrt{24\pi} [\sigma_z \times Y_2]_{00} P^{ST} | \begin{array}{c} n l s'' \\ \downarrow \\ i \end{array} \rangle \\
 &= \sqrt{24\pi} \langle \begin{array}{c} n' l' s' \\ \downarrow \\ i \end{array} | V_T^{eff ST}(r) P^{ST} \begin{array}{c} Y_2 \\ \downarrow \\ i \end{array} \begin{array}{c} n l \\ \downarrow \\ i \end{array} s'' \rangle \\
 &= \sqrt{24\pi} \sum_{l'' s'''} U \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ l & s'' & j \\ l'' & s''' & i \end{pmatrix} \langle \begin{array}{c} n' l' s' \\ \downarrow \\ i \end{array} | V_T^{eff ST}(r) P^{ST} | Y_2 \begin{array}{c} n l \\ \downarrow \\ i \end{array} \begin{array}{c} l'' s'' \\ \downarrow \\ i \end{array} s'' \rangle. \quad (C.59)
 \end{aligned}$$

Haciendo uso de los elementos de matriz reducidos, definidos según el Teorema de Wigner-Eckart como

$$\langle j' m' | T_{JM} | j m \rangle = c(j J j'; m M) \langle j' || T_J || j \rangle, \quad m' = m + M, \quad (C.60)$$

obtendremos

$$\begin{aligned}
 \Delta_t &= \sqrt{24\pi} \sum_{l'' s'''} U \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ l & s'' & j \\ l'' & s''' & i \end{pmatrix} \cdot (-1)^{l-l''} \cdot \langle Y_{l''} || Y_2 || Y_l \rangle \cdot \langle \begin{array}{c} n' l' s' \\ \downarrow \\ i \end{array} | V_T^{eff ST}(r) P^{ST} | \begin{array}{c} n l \\ \downarrow \\ i \end{array} \begin{array}{c} l'' s'' \\ \downarrow \\ i \end{array} s'' \rangle \\
 &= \sqrt{24\pi} \sum_{l'' s'''} U \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ l & s'' & j \\ l'' & s''' & i \end{pmatrix} \cdot (-1)^{l-l''} \cdot (-1)^{s''-s'''} \cdot \langle Y_{l''} || Y_2 || Y_l \rangle \cdot \langle s''' || \sigma_z || s'' \rangle \\
 &\quad \times \langle \begin{array}{c} n' l' s' \\ \downarrow \\ i \end{array} | V_T^{eff ST}(r) P^{ST} | \begin{array}{c} n l \\ \downarrow \\ i \end{array} \begin{array}{c} l'' s'' \\ \downarrow \\ i \end{array} s'' \rangle, \quad (C.61)
 \end{aligned}$$

e introduciendo los valores

$$\langle Y_{l''} || Y_2 || Y_l \rangle = \sqrt{\frac{(2l+1)5}{4\pi(2l''+1)}} \cdot c(l 2 l''; 00) \quad (C.62)$$

$$\langle s''' || \sigma_z || s'' \rangle = 2 \cdot \sqrt{\frac{5}{3}} \cdot \int_{s''} s''' \int_{s''} s'' \quad (C.63)$$

obtenemos ahora

$$\Delta_t = 10 \sqrt{2} \cdot U \begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ l & 1 & j \\ e'' & 1 & j \end{pmatrix} \cdot \sqrt{\frac{2e+1}{2e''+1}} \cdot C(l2e''; 00)$$

$$\cdot (-1)^{l-e''} \cdot \sum_{\substack{m_e' m_s' \\ m_e'' m_s''}} C(l' s' j; m_e' m_s') \cdot C(l'' 1 j; m_e'' m_s'')$$

$$\cdot \int_{m_e', m_e''} \int_{l', e''} \int_{m_s', m_s''} \int_{s', 1} \int_0^\infty R_{n'l'}(r) R_{ne}(r) V_T^{eff \uparrow \uparrow} r^2 dr. \quad (C.64)$$

Según vimos,

$$\begin{pmatrix} 2 & 2 & 0 \\ l & 1 & j \\ e' & 1 & j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} l & 1 & j \\ e' & 1 & j \\ 2 & 2 & 0 \end{pmatrix} = (-1)^{l+1-j-2} \cdot \frac{W(l1e'1; j2)}{\sqrt{(2j+1)5}}, \quad (C.65)$$

por tanto

$$\Delta_t = 2 \sqrt{30} \int_{s', s''} \int_{s', 1} \int_{e', e'', par} (-1)^{l-e'-j} \sqrt{2e+1} \cdot C(l2e'; 00) \cdot W(l1e'1; j2) \cdot \int_0^\infty R_{n'l'}(r) R_{ne}(r) V_T^{eff \uparrow \uparrow} r^2 dr. \quad (C.66)$$

Introduciendo este resultado en (C.15) y usando (C.17-26), llegamos al resultado

$$\begin{aligned} \Delta_T &= \left\langle \begin{array}{c} \text{Diagram 1} \\ \text{JT} \end{array} \middle| V_T^{eff \uparrow \uparrow} S_{12} P^{1T} \middle| \begin{array}{c} \text{Diagram 2} \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1, n_2} \delta_{l_1, l_2} \delta_{j_1, j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3, n_4} \delta_{l_3, l_4} \delta_{j_3, j_4}}} \cdot 2 \cdot \sqrt{30}, \\ &\cdot \sum_{\substack{\lambda \lambda' \\ n_e n_e' \\ N L_j}} U \begin{pmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda & 1 & J \end{pmatrix} \cdot U \begin{pmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & 1 & J \end{pmatrix} \cdot \int_{e', e'', par} (-1)^{\lambda+\lambda'} \cdot (-1)^{l-e'-j} \sqrt{2e+1} \cdot C(l2e'; 00). \quad (C.67) \\ &\cdot M_{j_1}(n_e' N L_j; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_{j_2}(n_e N L_j; n_3 l_3 n_4 l_4) \cdot U(l e' J; \lambda_j) \cdot U(l e' J; \lambda_j) \cdot W(l e' 1; j 2) \cdot \int_0^\infty R_{n_e' l'}(r) R_{n_e l}(r) V_T^{eff \uparrow \uparrow} r^2 dr. \end{aligned}$$

Una última simplificación es posible haciendo uso de la regla de Biedenharn,

$$\begin{aligned} &\sum (2g+1) W(a'gdc; ac') W(bgec'; b'c) W(a'gfb; ab') \\ &= W(adbe; cf) W(a'db'e; c'f), \end{aligned} \quad (C.68)$$

obteniéndose la expresión final

$$\begin{aligned} \Delta_T &= \left\langle \begin{array}{c} n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \text{JT} \end{array} \middle| V_T^{eff} S_{12} P^{IT} \middle| \begin{array}{c} n_3 l_3 j_3 \quad n_4 l_4 j_4 \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{l_1 l_2} \delta_{j_1 j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3 n_4} \delta_{l_3 l_4} \delta_{j_3 j_4}}} \cdot 2\sqrt{30} \cdot \sum_{\substack{\lambda \lambda' \\ n' e' n l \\ NL}} \delta_{e+e', \text{par}} (-1)^{l+e-l-j} \\ &\cdot \sqrt{(2e+1)(2\lambda+1)(2\lambda'+1)} \cdot M_{\lambda'}(n' e' NL; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_{\lambda}(n l NL; n_3 l_3 n_4 l_4) \\ &\cdot C(e 2 e'; 00) \cdot W(\lambda \lambda' 11; 2J) \cdot W(e e' \lambda \lambda'; 2L) \cdot \int_0^{\infty} R_{n' l'}(r) R_{n l}(r) V_T^{eff}(r) r^2 dr. \end{aligned} \quad (C.69)$$

C.2.3. Componentes espín-órbita.

Este caso es totalmente similar al anterior, sólo que ahora interviene el operador espín-órbita  $\bar{L} \cdot \bar{S}$ , cuyo valor esperado entre los estados relativos caracterizados por los números cuánticos principal  $n$ , de momento orbital  $l$ , de espín  $S$  y angular  $j$ , será

$$\langle n' l' s'; j | V_{ls}^{eff} P^{IT} | n l s'; j \rangle = \int_{e, e'} \int_{s' s} \int_{s_1} \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - 2] \int_0^{\infty} R_{n' l'}(r) R_{n l}(r) V_{ls}^{eff}(r) r^2 dr. \quad (C.70)$$

Por tanto, obtendremos

$$\begin{aligned} \Delta_{LS} &= \left\langle \begin{array}{c} n_1 l_1 j_1 \quad n_2 l_2 j_2 \\ \text{JT} \end{array} \middle| V_{LS}^{\text{eff}}(r) \bar{L} \cdot \bar{S} P^{\text{IT}} \middle| \begin{array}{c} n_3 l_3 j_3 \quad n_4 l_4 j_4 \\ \text{JT} \end{array} \right\rangle \\ &= \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_1 n_2} \delta_{l_1 l_2} \delta_{j_1 j_2}}} \cdot \sqrt{\frac{2}{1 + \delta_{n_3 n_4} \delta_{l_3 l_4} \delta_{j_3 j_4}}} \cdot \sum_{\substack{\lambda' \lambda_j \\ n n' l N L}} U \begin{Bmatrix} l_1 & 1/2 & j_1 \\ l_2 & 1/2 & j_2 \\ \lambda' & 1 & J \end{Bmatrix} \cdot U \begin{Bmatrix} l_3 & 1/2 & j_3 \\ l_4 & 1/2 & j_4 \\ \lambda & 1 & J \end{Bmatrix} \\ &\cdot (-1)^{\lambda + \lambda'} \cdot M_{\lambda'}(n' l N L; n_1 l_1 n_2 l_2) \cdot M_{\lambda}(n l N L; n_3 l_3 n_4 l_4) \cdot \frac{1}{2} [j(j+1) - l(l+1) - 2] \\ &\cdot U(L l J 1; \lambda' j) \cdot U(L l J 1; \lambda j) \cdot \int_0^{\infty} R_{n'l}(r) R_{n l}(r) V_{LS}^{\text{eff}}(r) r^2 dr, \quad (C.71) \end{aligned}$$

de nuevo con la restricción  $l+s+T$  impar, y siendo válidos todos los comentarios hechos para las componentes anteriormente calculadas.

El resultado (C.70) anterior puede encontrarse fácilmente si, al igual que hicimos antes con el operador tensorial  $S_{12}$ , pero ahora de forma más sencilla y directa, expresamos el operador  $\bar{L} \cdot \bar{S}$  según

$$\bar{L} \cdot \bar{S} = -\sqrt{3} [\bar{\ell}_1 \times \bar{S}_1]_{00}, \quad (C.72)$$

donde, al igual que antes, indicamos simplemente

$$[\bar{\ell}_1 \times \bar{S}_1] = \sum_{\ell' m'} C(11 \ell'; m_\ell m' - m_\ell) \ell_{1 m_\ell} S_{1 m' - m_\ell} \quad (C.73)$$

$$[\bar{\ell}_1 \times \bar{S}_1]_{00} = C(110; 00) \ell_{10} S_{10} = -\sqrt{\frac{1}{3}} \ell_{10} S_{10}, \quad (C.74)$$

siendo  $\ell_{1m}$  y  $S_{1m}$  los correspondientes tensores irreducibles de rango uno contruidos para el operador  $\bar{l}$  de momento orbital relativo y el operador  $\bar{S}$  de espín del sistema de dos partículas,

$$\bar{\ell} = \bar{r} \times \bar{p} \quad (C.75)$$

$$\bar{S} = \frac{1}{2} (\bar{\sigma}_1 + \bar{\sigma}_2) \quad (C.76)$$

Podemos proceder por tanto calculando según :

$$\begin{aligned}
 & \langle n'l's'; j | V_{Ls}^{\text{effIT}} \bar{L} \cdot \bar{S} P^{IT} | n'l's''; j \rangle \\
 &= \langle \triangle_{i}^{n'l's'} | V_{Ls}^{\text{effIT}} (-\sqrt{3}) [l_x s_x]_{00} P^{IT} | \triangle_{i}^{n'l's''} \rangle \\
 &= -\sqrt{3} \times \langle \triangle_{i}^{n'l's'} | V_{Ls}^{\text{effIT}} P^{IT} | \ell_i \triangle_{i}^{n'l's''} \rangle \\
 &= -\sqrt{3} \sum_{\ell'' s''} u \begin{Bmatrix} 1 & 1 & 0 \\ \ell & s'' & j \\ \ell'' & s'' & j \end{Bmatrix} \cdot (-1)^{\ell+\ell''} \cdot \langle Y_{\ell''} || \ell_i || Y_{\ell} \rangle \cdot \langle \triangle_{i}^{n'l's'} | V_{Ls}^{\text{effIT}} P^{IT} | \triangle_{i}^{n'l''s''} \rangle \\
 &= -\sqrt{3} \sum \sqrt{(2\ell''+1)(2s''+1)(2j+1)} (-1)^{\ell+s''-j-1} \cdot W(\ell s'' \ell'' s''; j 1) \cdot
 \end{aligned}$$

$$\times \frac{1}{\sqrt{3(2j+1)}} \times (-1)^{1+s''-s''} \times \langle Y_{\ell''} || \ell_i || Y_{\ell} \rangle \times (-1)^{\ell+1-\ell''}$$

$$\times \langle s'' || S_i || s'' \rangle \times \sum_{\substack{m_{\ell}'' m_{s'}'' \\ m_{\ell}'' m_{s'}''}} c(\ell' s' j; m_{\ell}' m_{s}') c(\ell'' s'' j; m_{\ell}'' m_{s}''),$$

$$\times \int_{m_{\ell}', m_{s'}'} \int_{m_{\ell}'', m_{s}''} \int_{\ell', \ell''} \int_0^{\infty} R_{n'l'}(r) R_{n'l''}(r) V_{Ls}^{\text{effIT}} r^2 dr. \quad (C.77)$$

Introduciendo ahora el valor del coeficiente de Racah

$$W(\ell \ell \ell; j 1) = (-1)^{\ell-j} \times \frac{\ell(\ell+1)+2-j(j+1)}{\sqrt{24\ell(\ell+1)(2\ell+1)}} \quad (C.78)$$

y los de los elementos de matriz reducidos

$$\langle Y_{\ell'} || \ell_i || Y_{\ell} \rangle = \int_{\ell', \ell} \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad (C.79)$$

$$\langle s'' || S_i || s'' \rangle = \int_{s'', s''} \int_{s'', j} \sqrt{2}, \quad (C.80)$$

obtenemos finalmente la expresión (C.70) anterior.

APENDICE D:

DENSIDADES DE ESTADOS DEL OSCILADOR ARMONICO: DEFINICION Y OBTENCION.

EXPRESION EN FUNCION DE ELLAS DEL VALOR ESPERADO DE UN POTENCIAL  
CENTRAL PARA EL ESTADO FUNDAMENTAL DE UN NUCLEO DE GAPA P CERRADA.

- D.0. Introducción: definición de las densidades de estados del oscilador armónico.
- D.1. Cálculo de las densidades para el núcleo  $A=16$ .
- D.2. Cálculo de las densidades para el núcleo  $A=12$ .
- D.3. Cálculo de las densidades para el núcleo  $A=8$ .
- D.4. Expresión del valor esperado de un potencial central en función de las densidades de estados del oscilador para el estado fundamental de un núcleo de capa  $p$  cerrada.
- D.5. Generalización para núcleos de capa  $p$  abierta: densidades promediadas.

D.0. Introducción: definición de unas densidades de estados del oscilador armónico.

Definamos unas densidades de estados del oscilador armónico, a las que denominaremos respectivamente como "directa" y de "intercambio" por las expresiones

$$\left. \begin{aligned} \rho_d(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= \sum_{ij} R_i^z(1) R_j^z(2) \\ \rho_{ex}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= \sum_{ij} R_i^*(1) R_j^*(2) R_i(2) R_j(1), \end{aligned} \right\} \quad (D.1)$$

donde cada  $R$  representa la parte espacial de las funciones de onda propias del potencial del oscilador armónico.

En este apéndice encontraremos sus expresiones analíticas para núcleo de los considerados. Obtenidas éstas, procederemos a efectuar el cambio a coordenadas relativas  $\bar{r}$  y de centro de masas  $\bar{R}$ ,

$$\left. \begin{aligned} \bar{r} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \\ \bar{R} &= \frac{1}{2} (\bar{r}_1 + \bar{r}_2), \end{aligned} \right\} \quad (D.2)$$

de forma que, integrando sobre esta última, encontraremos las densidades relativas

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_d(\bar{r}) &= \int \rho_d(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} \\ \bar{\rho}_{ex}(\bar{r}) &= \int \rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R}. \end{aligned} \right\} \quad (D.3)$$

Estas densidades, como veremos en el apartado cuarto de este apéndice, nos harán falta en las combinaciones lineales que notaremos como

$$\left. \begin{aligned} \rho_+ (\vec{r}) &= r^2 (\bar{\rho}_d (\vec{r}) + \bar{\rho}_{ex} (\vec{r})) \\ \rho_- (\vec{r}) &= r^2 (\bar{\rho}_d (\vec{r}) - \bar{\rho}_{ex} (\vec{r})) \end{aligned} \right\} \quad (D.4)$$

y cuyas expresiones calcularemos a partir de las anteriores.

Si trabajamos en coordenadas cartesianas, las funciones propias  $R$  vendrán dadas por la expresión

$$R_{n_1, n_2, n_3} (\vec{r}) = \left( \frac{\beta}{\pi} \right)^{3/4} \sqrt{\frac{1}{2^{n_1+n_2+n_3} n_1! n_2! n_3!}} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} H_{n_1}(\sqrt{\beta}x) H_{n_2}(\sqrt{\beta}y) H_{n_3}(\sqrt{\beta}z), \quad (D.5)$$

simbolizando  $n_1$ ,  $n_2$  y  $n_3$  los números cuánticos principales asociados a cada dimensión;  $H_n$  los correspondientes polinomios de Hermite;  $\beta$  el parámetro del oscilador

$$\beta = \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{b}} \quad (D.6)$$

A partir de estas expresiones vamos a proceder a calcular para cada uno de los núcleos de número másico  $5 \leq A \leq 16$  las correspondientes densidades anteriormente definidas.

En cada núcleo, según el modelo de capas, las partículas se encontrarán repartidas entre las capas  $0s$  y  $0p$  (estado fundamental) y, por tanto, poseen 0 ó 1 cuanto de energía. Los valores posibles para los tres números cuánticos  $(n_1, n_2, n_3)$  serán consecuentemente

$$\left\{ (0,0,0), (1,0,0), (0,1,0), (0,0,1) \right\}, \quad (D.7)$$

con los cuales se asocian respectivamente las funciones

$$\left. \begin{aligned} R_{0s} &= A e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \\ R_{0p_x} &= A \sqrt{2\beta} x e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \\ R_{0p_y} &= A \sqrt{2\beta} y e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \\ R_{0p_z} &= A \sqrt{2\beta} z e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \end{aligned} \right\} \quad (D.8)$$

donde se ha introducido una constante  $A$  de valor

$$A = \left(\frac{\beta}{n}\right)^{3/4}. \quad (0.9)$$

Como ya dijimos (apartado 5.1), si el núcleo bajo consideración es uno de los tres de número másico  $A=8, 12$  ó  $16$ , tomaremos en cuenta las funciones  $0p_x$ ;  $0p_x$ ,  $0p_y$  ó  $0p_x$ ,  $0p_y$ ,  $0p_z$  de la capa  $p$ , respectivamente, a la hora de calcular las densidades directa y de intercambio. Para los restantes núcleos, en el apartado quinto calcularemos unas densidades denominadas "promediadas", según el procedimiento de aproximación ya explicado también anteriormente en el apartado 5.1 de esta memoria.

#### D.1. Cálculo de las densidades para el núcleo $A=16$ .

En este caso los tres orbitales  $0p$  contribuyen a la suma en las definiciones ( D.1 ) y, por tanto, se tiene:

$$\begin{aligned} \rho_d(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \times \left\{ 1 + 4\beta^2 [x_1^2 x_2^2 + x_1^2 y_2^2 + x_1^2 z_2^2 + y_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 \right. \\ &\quad \left. + y_1^2 z_2^2 + z_1^2 x_2^2 + z_1^2 y_2^2 + z_1^2 z_2^2] + 2\beta [x_1^2 + y_1^2 + z_1^2 + x_2^2 + y_2^2 + z_2^2] \right\} \\ &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \times \left\{ 1 + 4\beta^2 (\bar{r}_1^2 \cdot \bar{r}_2^2) + 2\beta (\bar{r}_1^2 + \bar{r}_2^2) \right\} \quad (D.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{ex}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \times \left\{ 1 + 4\beta^2 [x_1 x_2 y_1 y_2 + x_1 x_2 z_1 z_2 + y_1 y_2 z_1 z_2 \right. \\ &\quad \left. + x_1^2 x_2^2 + y_1^2 y_2^2 + z_1^2 z_2^2] + 4\beta [x_1 x_2 + y_1 y_2 + z_1 z_2] \right\} \\ &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \times \left\{ 1 + 4\beta^2 (\bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2)^2 + 4\beta (\bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2) \right\}. \quad (D.11) \end{aligned}$$

Efectuando ahora la transformación a coordenadas relativa-centro de masas,

$$\left. \begin{aligned} \bar{r} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \\ \bar{R} &= \frac{1}{2}(\bar{r}_1 + \bar{r}_2) \end{aligned} \right\} \left. \begin{aligned} \bar{r}_1 &= \frac{\bar{r}}{2} + \bar{R} \\ \bar{r}_2 &= -\frac{\bar{r}}{2} + \bar{R} \end{aligned} \right\} \quad (D.12)$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{r}_1^2 &= \frac{\bar{r}^2}{4} + \bar{R}^2 + \bar{r} \cdot \bar{R} \\ \bar{r}_2^2 &= \frac{\bar{r}^2}{4} + \bar{R}^2 - \bar{r} \cdot \bar{R} \end{aligned} \right\} \left. \begin{aligned} \bar{r}_1^2 + \bar{r}_2^2 &= \frac{\bar{r}^2}{2} + 2\bar{R}^2 \\ \bar{r}_1^2 \cdot \bar{r}_2^2 &= \frac{\bar{r}^4}{16} + \bar{R}^4 + \frac{1}{2}\bar{r}^2\bar{R}^2 - (\bar{r} \cdot \bar{R})^2 \end{aligned} \right\} \quad (D.13)$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2 &= -\frac{\bar{r}^2}{4} + \bar{R}^2 \\ (\bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2)^2 &= \frac{\bar{r}^4}{16} + \bar{R}^4 - \frac{1}{2}\bar{r}^2\bar{R}^2 \end{aligned} \right\} \quad (D.14)$$

y, sustituyendo en las anteriores expresiones, llegamos al resultado:

$$\rho_d(\bar{r}, \bar{R}) = \left(\frac{\beta}{n}\right)^3 e^{-\beta \frac{r^2}{2}} e^{-2\beta R^2} \times \left[ \frac{1}{4}\beta^2 r^4 + \beta r^2 + 1 + 2\beta^2 r^2 R^2 + 4\beta R^2 + 4\beta^2 R^4 - 4\beta^2 (\bar{r} \cdot \bar{R})^2 \right] \quad (D.15)$$

$$\rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) = \left(\frac{\beta}{n}\right)^3 e^{-\beta \frac{r^2}{2}} e^{-2\beta R^2} \times \left[ \frac{1}{4}\beta^2 r^4 - \beta r^2 + 1 - 2\beta^2 r^2 R^2 + 4\beta R^2 + 4\beta^2 R^4 \right]$$

A continuación integramos sobre la coordenada centro de masas

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_d(\bar{r}) &= \int \rho_d(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left( \frac{1}{4}\beta^2 r^4 + \frac{3}{2}\beta r^2 + \frac{31}{4} \right) \\ \bar{\rho}_{ex}(\bar{r}) &= \int \rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left( \frac{1}{4}\beta^2 r^4 - \frac{5}{2}\beta r^2 + \frac{31}{4} \right) \end{aligned} \right\} \quad (D.16)$$

y, finalmente, obtenemos las combinaciones

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= r^2(\bar{\rho}_d(r) + \bar{\rho}_{ex}(r)) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left( \frac{1}{2}\beta^2 r^6 - \beta r^4 + \frac{31}{2} r^2 \right) \\ \rho_-(r) &= r^2(\bar{\rho}_d(r) - \bar{\rho}_{ex}(r)) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} 4\beta r^4 \end{aligned} \right\} \quad (D.17)$$

D.2. Cálculo de las densidades para el núcleo A=12.

En este caso en las sumas de la expresión ( D.1 ) contribuyen los orbitales  $Op_x$  y  $Op_y$ , de forma que obtenemos

$$\begin{aligned} \rho_d(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \cdot \left[ (1 + 2\beta x_1^2 + 2\beta y_1^2)(1 + 2\beta x_2^2 + 2\beta y_2^2) \right] \\ &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \cdot \left[ (1 + 2\beta r_1^2 - 2\beta z_1^2)(1 + 2\beta r_2^2 - 2\beta z_2^2) \right] \quad (D.18) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_{ex}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \cdot \left[ 1 + 2\beta(x_1 x_2 + y_1 y_2) \right]^2 \\ &= A^4 e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)} \cdot \left[ 1 + 2\beta(\bar{r}_1 \cdot \bar{r}_2 - z_1 z_2) \right]^2. \quad (D.19) \end{aligned}$$

Si usamos de nuevo las fórmulas ( D.13 ), conjuntamente con las

$$\left. \begin{aligned} \bar{R} &= (X, Y, Z) \\ \bar{r} &= (x, y, z) \\ z_1^2 &= Z^2 + \frac{z^2}{4} + Zz \\ z_2^2 &= Z^2 + \frac{z^2}{4} - Zz \end{aligned} \right\} \quad (D.20)$$

llegamos al resultado:

$$\begin{aligned} \rho_d(\bar{r}, \bar{R}) &= A^4 e^{-\beta\left(\frac{r^2}{2} + 2R^2\right)} \cdot \left\{ \left[ 1 + 2\beta\left(R^2 + \frac{r^2}{4} - Z^2 - \frac{z^2}{4}\right) \right]^2 - 4\beta(\bar{R} \cdot \bar{r} - Zz) \right\} \\ \rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) &= A^4 e^{-\beta\left(\frac{r^2}{2} + 2R^2\right)} \cdot \left\{ 1 + 2\beta\left[R^2 - \frac{r^2}{4} - \frac{Z^2}{4} - \frac{z^2}{4}\right] \right\}^2. \quad (D.21) \end{aligned}$$

Integrando ahora sobre la parte de centro de masas, encontramos

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_d(r) &= \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\beta\frac{r^2}{2}} \cdot \left[ \frac{2}{15} \beta^2 r^4 + \frac{2}{3} \beta r^2 + 5 \right] \\ \bar{\rho}_{ex}(r) &= \left(\frac{\beta}{2\pi}\right)^{3/2} e^{-\beta\frac{r^2}{2}} \cdot \left[ \frac{2}{15} \beta^2 r^4 - \frac{4}{3} \beta r^2 + 5 \right] \end{aligned} \right\} \quad (D.22)$$

Finalmente, las combinaciones { D.4 } son, en este caso:

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \times \left[ \frac{4}{15} \beta^2 r^6 - \frac{2}{3} \beta r^4 + 10 r^2 \right] \\ \rho_-(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \times 2 \cdot \beta r^4 \end{aligned} \right\} \quad (D.23)$$

### D.3. Cálculo de las densidades para el núcleo A=8.

Similarmente a lo hecho en los dos apartados anteriores, pero considerando ahora contribución sólo por parte del orbital  $0p_x$ , se obtienen los siguientes resultados:

$$\left. \begin{aligned} \rho_d(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= A^4 e^{-\beta(r_1^2+r_2^2)} \times \left[ 1 + 2\beta x_1^2 + 2\beta x_2^2 + 4\beta^2 x_1^2 x_2^2 \right] \\ \rho_{ex}(\bar{r}_1, \bar{r}_2) &= A^4 e^{-\beta(r_1^2+r_2^2)} \times \left[ 1 + 4\beta x_1 x_2 + 4\beta^2 x_1^2 x_2^2 \right] \end{aligned} \right\} \quad (D.24)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_d(\bar{r}, \bar{R}) &= A^4 e^{-\beta\left(\frac{r^2}{2} + 2R^2\right)} \times \left[ 1 + 2\beta\left(2X^2 + \frac{X^2}{2}\right) + 4\beta^2\left(X^4 + \frac{X^4}{16} - \frac{1}{2} X^2 X^2\right) \right] \\ \rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) &= A^4 e^{-\beta\left(\frac{r^2}{2} + 2R^2\right)} \times \left[ 1 + 2\beta\left(2X^2 - \frac{X^2}{2}\right) + 4\beta^2\left(X^4 + \frac{X^4}{16} - \frac{1}{2} X^2 X^2\right) \right] \end{aligned} \right\} \quad (D.25)$$

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_d(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \times \left[ \frac{1}{20} \beta^2 r^4 + \frac{1}{6} \beta r^2 + \frac{11}{4} \right] \\ \bar{\rho}_{ex}(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \times \left[ \frac{1}{20} \beta^2 r^4 - \frac{1}{2} \beta r^2 + \frac{11}{4} \right] \end{aligned} \right\} \quad (D.26)$$

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \times \left[ \frac{1}{10} \beta^2 r^6 - \frac{1}{3} \beta r^4 + \frac{11}{2} r^2 \right] \\ \rho_-(r) &= \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \times \frac{2}{3} \beta r^4 \end{aligned} \right\} \quad (D.27)$$

D.4. Expresión del valor esperado de un potencial central en función de las densidades de estados del oscilador para el estado fundamental de un núcleo de capa p cerrada.

Consideremos un potencial central a dos cuerpos dado en la base Wigner-Barlett-Heisenberg-Majorana:

$$V_c(1,2) = W(r) + B(r)P^\sigma - H(r)P^\tau - M(r)P^\sigma P^\tau, \quad (D.28)$$

donde  $P^\sigma$ ,  $P^\tau$  representan los correspondientes operadores de intercambio de espín e isoespín del sistema de dos nucleones;  $W(r)$ ,  $B(r)$ ,  $H(r)$  y  $M(r)$ , las funciones radiales de cada componente.

Representando el estado fundamental de un núcleo de número másico  $A$  mediante la adecuada función de ondas  $|\phi_0\rangle$ , el valor esperado del anterior potencial central, sumado para los  $A$  cuerpos, se expresará (supuesta la función normalizada):

$$\begin{aligned} \Delta &= \langle \phi_0 | \sum_{1 \leq i < j \leq A} V_c(i,j) | \phi_0 \rangle \\ &= \sum_{1 \leq i < j \leq A} \langle ij | V_c(i,j) | ij - ji \rangle. \end{aligned} \quad (D.29)$$

Consideremos ahora de nuevo como orbitales monoparticulares los del oscilador armónico, representándolos por funciones base del espacio producto directo de los de coordenadas espaciales, de espín y de isoespín

$$|i\rangle \equiv |\Theta_{\alpha_i}\rangle = |R_{n_i l_i m_i}(\vec{r}) \chi_{\sigma_i} \Theta_{\tau_i}\rangle, \quad (D.30)$$

de manera que obtenemos:

$$\begin{aligned} \Delta &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} \langle R_i(\vec{r}_1) \chi_i(1) \Theta_i(1) R_j(\vec{r}_2) \chi_j(2) \Theta_j(2) | V_c(i,j) | \\ &\quad R_i(\vec{r}_1) \chi_i(1) \Theta_i(1) R_j(\vec{r}_2) \chi_j(2) \Theta_j(2) \\ &\quad - R_j(\vec{r}_1) \chi_j(1) \Theta_j(1) R_i(\vec{r}_2) \chi_i(2) \Theta_i(2) \rangle. \end{aligned} \quad (D.31)$$

Intercambiando las coordenadas de espín e isoespín en la derecha para el segundo término,

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle R_i(\bar{r}_1) \chi_i(1) \Theta_i(1) R_j(\bar{r}_2) \chi_j(2) \Theta_j(2) | V_c(i,j) | R_i(\bar{r}_1) \chi_i(1) \Theta_i(1) R_j(\bar{r}_2) \chi_j(2) \Theta_j(2) - P^\sigma P^\tau R_j(\bar{r}_1) \chi_i(1) \Theta_i(1) R_i(\bar{r}_2) \chi_j(2) \Theta_j(2) \rangle \quad (0.32)$$

y, sumando sobre las coordenadas de espín e isoespín, obtendremos para cada componente, puesto que suponemos el núcleo saturado,

$$\Delta = \frac{1}{2} \sum_{ij} \langle (16W(r) + 8B(r) - 8H(r) - 4M(r)) R_i^2(1) R_j^2(2) - (4W(r) + 8B(r) - 8H(r) - 16M(r)) R_i^*(1) R_j^*(2) R_j(1) R_i(2) \rangle \quad (0.33)$$

Introduzcamos ahora las densidades de estados del oscilador anteriormente definidas y denominadas directa y de intercambio, dadas por las expresiones (D.1).

A partir de ellas, pasando a coordenadas relativa y centro de masas (apartado D.0. de este apéndice), definimos unas densidades dependientes exclusivamente de la coordenada relativa  $r$  y, en concreto de su módulo por tenerse simetría esférica (capas cerradas):

$$\left. \begin{aligned} \bar{\rho}_d(\bar{r}) &= \int_V \rho_d(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} \\ \bar{\rho}_{ex}(\bar{r}) &= \int_V \rho_{ex}(\bar{r}, \bar{R}) d\bar{R} \end{aligned} \right\} \quad (0.34)$$

donde

$$\left. \begin{aligned} \bar{r} &= \bar{r}_1 - \bar{r}_2 \\ \bar{R} &= \frac{1}{2} (\bar{r}_1 + \bar{r}_2) \end{aligned} \right\} \quad (0.35)$$

El Jacobiano de la transformación tiene un valor

$$J(\bar{r}_1, \bar{r}_2; \bar{r}, \bar{R}) = \begin{vmatrix} \frac{\partial r_1}{\partial r} & \frac{\partial r_1}{\partial R} \\ \frac{\partial r_2}{\partial r} & \frac{\partial r_2}{\partial R} \end{vmatrix} = 1 \quad (0.36)$$

y, por tanto, obtenemos

$$\begin{aligned} \Delta &= \int_V \frac{1}{2} [(16W(r) + 8B(r) - 8H(r) - 4M(r))\bar{\rho}_d(r) - (4W(r) + 8B(r) - 8H(r) - 16M(r))\bar{\rho}_{ex}(r)] \bar{r} d\bar{r} \\ &= 2\pi \int_0^\infty [(16W(r) + 8B(r) - 8H(r) - 4M(r))\bar{\rho}_d(r) - (4W(r) + 8B(r) - 8H(r) - 16M(r))\bar{\rho}_{ex}(r)] r^2 dr, \end{aligned} \quad (0.37)$$

o, si expresamos el potencial descomponiéndolo en componentes sobre cada canal S-T, haciendo uso del conjunto de ecuaciones (D.49), llegaremos finalmente al resultado

$$\Delta = 2\pi \int_0^\infty [3(V_{pt} + V_{ps})\rho_+(r) + (9V_{it} + V_{is})\rho_-(r)] dr, \quad (0.38)$$

donde los subíndices pt, ps, it e is simbolizan respectivamente las componentes (centrales) en canal S-T par-triplete, par-singlete, impar-triplete e impar-singlete;  $\rho_+(r)$  y  $\rho_-(r)$  son las combinaciones de  $\bar{\rho}_d(r)$  y  $\bar{\rho}_{ex}(r)$  ya calculadas y de expresión

$$\left. \begin{aligned} \rho_+(r) &= r^2 (\bar{\rho}_d(r) + \bar{\rho}_{ex}(r)) \\ \rho_-(r) &= r^2 (\bar{\rho}_d(r) - \bar{\rho}_{ex}(r)) \end{aligned} \right\} \quad (0.40)$$

D.5. Generalización para núcleos de capa p abierta: densidades promediadas.

En este apartado procedemos a encontrar las expresiones analíticas de las densidades de estados del oscilador que hemos denominado promediadas, cuya construcción fue explicada en el apartado 5.1 de esta memoria.

Para ello partimos de la fórmula (6.15):

$$\begin{aligned}
 \langle V_c \rangle \approx & \sum_{\ell ST} (2\ell+1)(2S+1)(2T+1) \langle \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{S} \\ \triangle \\ \ell ST \end{array} | V_{(1,2)} | \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{S} \\ \triangle \\ \ell ST \end{array} \rangle \\
 & + \frac{n_p}{12} \sum_{\ell ST} (2\ell+1)(2S+1)(2T+1) \langle \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \ell ST \end{array} | V_{(1,2)} | \begin{array}{c} \text{S} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \ell ST \end{array} \rangle \\
 & + \frac{n_p(n_p-1)}{12 \cdot 11} \sum_{\ell ST} (2\ell+1)(2S+1)(2T+1) \langle \begin{array}{c} \text{P} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \ell ST \end{array} | V_{(1,2)} | \begin{array}{c} \text{P} \quad \text{P} \\ \triangle \\ \ell ST \end{array} \rangle,
 \end{aligned}
 \tag{D.41}$$

donde  $n_p$  representa el número de partículas presentes en la capa p en el núcleo en cuestión. Obsérvese que para A=16 la expresión es exacta.

Consideremos para  $V_{(12)}$  la expresión general

$$\begin{aligned}
 V_c &= \sum_{ij} V_{(ij)} \\
 V_{(12)} &= V_c(r) + V_\sigma(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2) + V_\tau(\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2) + V_{\sigma\tau}(\vec{\sigma}_1 \cdot \vec{\sigma}_2)(\vec{\tau}_1 \cdot \vec{\tau}_2),
 \end{aligned}
 \tag{D.42}$$

y recordemos que para cada estado antisimétrico de dos partículas

$$\begin{aligned}
 | \begin{array}{c} n_r l_1 \\ \triangle \\ n_2 l_2 \\ \ell \end{array} \rangle &= \frac{(1 - P_{12})}{\sqrt{2(1 + \delta_{n_r, n_2} \delta_{\ell_1, \ell_2})}} | \begin{array}{c} n_r l_1 \\ \triangle \\ n_2 l_2 \\ \ell \end{array} \rangle \\
 &= \frac{(1 - P_{12})}{\sqrt{2(1 + \delta_{n_r, n_2} \delta_{\ell_1, \ell_2})}} \sum_{n_r \ell_r N L} M_{\ell}^{(n_r \ell_r N L; n_1 \ell_1 n_2 \ell_2)} | \begin{array}{c} n_r l_r \\ \triangle \\ N L \\ \ell \end{array} \rangle \\
 2n_r + 2N + \ell_r + L &= 2n_1 + 2n_2 + \ell_1 + \ell_2 \quad (D.43)
 \end{aligned}$$

tenemos las restricciones (ver apéndice C, apartado 1) :

i)  $1+S+T$  impar para partículas en la misma capa

ii)  $1_r+S+T$  impar para todos los estados,

y que los valores esperados de los operadores  $\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2$ ,  $\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2$  y

$(\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2)(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2)$  en los distintos estados S-T son

$$\begin{aligned}
 \langle S=0, T=0 | \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 | S=0, T=0 \rangle &= -3 \\
 \langle S=0, T=1 | \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 | S=0, T=1 \rangle &= -3 \\
 \langle S=1, T=0 | \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 | S=1, T=0 \rangle &= +1 \\
 \langle S=1, T=1 | \bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2 | S=1, T=1 \rangle &= +1 \\
 \\ 
 \langle S=0, T=0 | \bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2 | S=0, T=0 \rangle &= -3 \\
 \langle S=0, T=1 | \bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2 | S=0, T=1 \rangle &= +1 \\
 \langle S=1, T=0 | \bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2 | S=1, T=0 \rangle &= -3 \\
 \langle S=1, T=1 | \bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2 | S=1, T=1 \rangle &= +1 \\
 \\ 
 \langle S=0, T=0 | (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2)(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2) | S=0, T=0 \rangle &= +9 \\
 \langle S=0, T=1 | (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2)(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2) | S=0, T=1 \rangle &= -3 \\
 \langle S=1, T=0 | (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2)(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2) | S=1, T=0 \rangle &= -3 \\
 \langle S=1, T=1 | (\bar{\sigma}_1 \cdot \bar{\sigma}_2)(\bar{\tau}_1 \cdot \bar{\tau}_2) | S=1, T=1 \rangle &= +1
 \end{aligned}$$

(D.44)

y cero para elementos no diagonales.

Haciendo uso de todos estos resultados e introduciendo los valores de los coeficientes de Brody-Moshinsky necesarios, obtenemos la expresión :

$$\begin{aligned}
\langle V_c \rangle \cong & \langle 00 | V_c | 00 \rangle \cdot \left[ 6 + \frac{3}{2} n_p + \frac{3}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 01 | V_c | 01 \rangle \cdot \left[ \frac{5}{2} n_p + \frac{5}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 02 | V_c | 02 \rangle \cdot \left[ \frac{5}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 10 | V_c | 10 \rangle \cdot \left[ \frac{1}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
\\
& + \langle 00 | V_\sigma | 00 \rangle \cdot \left[ -6 - \frac{3}{2} n_p - \frac{3}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 01 | V_\sigma | 01 \rangle \cdot \left[ \frac{3}{2} n_p + \frac{3}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 02 | V_\sigma | 02 \rangle \cdot \left[ -\frac{5}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 10 | V_\sigma | 10 \rangle \cdot \left[ -\frac{1}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
\\
& + \langle 00 | V_\pi | 00 \rangle \cdot \left[ -6 - \frac{3}{2} n_p - \frac{3}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 01 | V_\pi | 01 \rangle \cdot \left[ \frac{3}{2} n_p + \frac{3}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 02 | V_\pi | 02 \rangle \cdot \left[ -\frac{5}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 10 | V_\pi | 10 \rangle \cdot \left[ -\frac{1}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
\\
& + \langle 00 | V_{\sigma\pi} | 00 \rangle \cdot \left[ -18 - \frac{9}{2} n_p - \frac{9}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 01 | V_{\sigma\pi} | 01 \rangle \cdot \left[ \frac{9}{2} n_p + \frac{9}{22} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 02 | V_{\sigma\pi} | 02 \rangle \cdot \left[ -\frac{15}{44} n_p (n_p - 1) \right] \\
& + \langle 10 | V_{\sigma\pi} | 10 \rangle \cdot \left[ -\frac{3}{44} n_p (n_p - 1) \right] , \tag{0.45}
\end{aligned}$$

donde cada  $|n_l\rangle$  refiere a la parte radial de la correspondiente función propia del oscilador,

$$|n_l\rangle \equiv |R_{n_l}(r)\rangle , \tag{0.46}$$

puesto que se ha efectuado ya la integración sobre las coordenadas angulares, de forma que

$$\langle n_l | V_i | n_l \rangle = \int_0^\infty R_{n_l}^2(r) V_i(r) r^2 dr . \tag{0.47}$$

Si procedemos ahora a realizar un cambio de base en la expresión del potencial, pasando a darlo por canales S-T

$$V(l, 2) = V_{(r)}^{00} P_1 P^- + V_{(r)}^{01} P_1 P^+ + V_{(r)}^{11} P_3 P^- + V_{(r)}^{10} P_3 P^+, \quad (0.48)$$

y aplicando el conjunto de ecuaciones

$$\left. \begin{aligned} V_c &= \frac{1}{16} (3V^{10} + 3V^{01} + 9V^{11} + V^{00}) \\ V_r &= \frac{1}{16} (V^{10} - 3V^{01} + 3V^{11} - V^{00}) \\ V_z &= \frac{1}{16} (-3V^{10} + V^{01} + 3V^{11} - V^{00}) \\ V_{\sigma z} &= \frac{1}{16} (-V^{10} - V^{01} + V^{11} + V^{00}) \end{aligned} \right\}, \quad (0.49)$$

llegamos al resultado

$$\langle V_c \rangle \approx \frac{1}{16} \int_0^\infty [(V^{10} + V^{01}) \rho_1(r, n_p) + (9V^{11} + V^{00}) \rho_2(r, n_p)] r^2 dr, \quad (0.50)$$

donde las funciones  $\rho_1$  y  $\rho_2$  tienen las expresiones

$$\begin{aligned} \rho_1(r, n_p) &= R_{00}^2(r) [48 + 12n_p + \frac{12}{11} n_p(n_p-1)] + R_{02}^2(r) [\frac{10}{11} n_p(n_p-1)] + R_{10}^2(r) [\frac{2}{11} n_p(n_p-1)] \\ \rho_2(r, n_p) &= R_{01}^2(r) [4n_p + \frac{4}{11} n_p(n_p-1)]. \end{aligned} \quad (0.51)$$

Si comparamos la anterior expresión con la aplicada en el caso de un núcleo de capa p cerrada (ver apartado D.4 de este apéndice),

$$\langle V_c \rangle = 2\pi \int_0^\infty [3(V^{10} + V^{01}) \rho_+(r) + (9V^{11} + V^{00}) \rho_-(r)] dr, \quad (0.52)$$

obtenemos directamente la expresión de las densidades  $\rho_+$  y  $\rho_-$  que se usarán en el caso presente:

$$\begin{aligned} \rho_+(r, n_p) &= \frac{r^2}{96\pi} \left\{ R_{00}^2 [48 + 12n_p + \frac{12}{11} n_p(n_p-1)] + R_{02}^2 [\frac{10}{11} n_p(n_p-1)] + R_{10}^2 [\frac{2}{11} n_p(n_p-1)] \right. \\ \rho_-(r, n_p) &= \left. \frac{r^2}{32\pi} \left\{ R_{01}^2 [4n_p + \frac{4}{11} n_p(n_p-1)] \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (0.53)$$

APENDICE E:

OBTENCION DE LAS ECUACIONES VARIACIONALES DE EULER-LAGRANGE.

Tenemos determinada la energía para el estado fundamental de cada núcleo de número másico A, expresándola de forma aproximada (A=16) como el funcional general (6.16),

$$H_{00} = H_{00} \left[ f_{i\pm}^{\pm}(r), \frac{df_{i\pm}^{\pm}}{dr}, i=1,2,3, \rho_{\pm}(r, n_p), V_c^{eff}(r) \right] \quad (E.1)$$

donde  $\left\{ f_{i\pm}^{\pm} \right\}_{i=1}^3$  representan las componentes del operador de correlación a dos cuerpos

$$= \frac{1}{2} \sum_{\kappa=1}^A \epsilon_{\kappa} + 2\pi \int_0^{\infty} \left[ (V_c^{eff10} + V_c^{eff01}) 3\rho_{+} + (9V_c^{eff11} + V_c^{eff00}) \rho_{-} \right] dr,$$

$$F_2(12) = \sum_{i=\pm, -} F^i(12) P^i$$

$$F^i(12) = f_1^i(r) P_1 + f_2^i(r) P_3 Q + f_3^i(r) P_3 (1-Q), \quad (E.2)$$

siendo  $P^+$ ,  $P^-$ ,  $P_1$ ,  $P_3$  los operadores de proyección sobre estados par, impar, singlete y triplete de espín;  $\rho_{\pm}(r, n_p)$  es una densidad promedio de estados del oscilador dependiente del número de partículas en la capa  $0p$  ( $n_p=A-4$ ) que posea el núcleo en cuestión y de valores (ver apéndice D);

$$\begin{array}{l} n_p = 12 \\ (A=16) \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \rho_{+}(r, 12) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left(\frac{1}{2} \beta^2 r^6 - \beta r^4 + \frac{31}{2} r^2\right) \\ \rho_{-}(r, 12) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} 4\beta r^4 \end{array} \right. \quad (E.3)$$

$$\begin{array}{l} n_p = 8 \\ (A=12) \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \rho_{+}(r, 8) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left(\frac{4}{15} \beta^2 r^6 - \frac{2}{3} \beta r^4 + 10 r^2\right) \\ \rho_{-}(r, 8) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} 2\beta r^4 \end{array} \right. \quad (E.4)$$

$$\begin{array}{l} n_p = 4 \\ (A=8) \end{array} \left\{ \begin{array}{l} \rho_{+}(r, 4) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \left(\frac{1}{10} \beta^2 r^6 - \frac{1}{3} \beta r^4 + \frac{11}{2} r^2\right) \\ \rho_{-}(r, 4) = \left(\frac{\beta}{2n}\right)^{3/2} e^{-\beta \frac{r^2}{2}} \frac{2}{3} \beta r^4 \end{array} \right. \quad (E.5)$$

$$\rho_{\pm}(r, n_p) = \frac{r^2}{96\pi} \left\{ R_{00}^2 [48 + 12n_p + \frac{12}{11} n_p(n_p-1)] + R_{02}^2 [\frac{10}{11} n_p(n_p-1)] + R_{10}^2 [\frac{2}{11} n_p(n_p-1)] \right\}$$

$$(A \neq 8, 12, 16) \quad \rho_{\pm}(r, n_p) = \frac{r^2}{32\pi} \left\{ R_{01}^2 [4n_p + \frac{4}{11} n_p(n_p-1)] \right\}, \quad (E.6)$$

siendo  $\beta$  el parámetro del oscilador

$$\beta = \frac{m\omega}{\hbar} = \frac{1}{b} ; \quad (E.7)$$

$V_c^{\text{effST}}(r)$  representa las componentes centrales del potencial efectivo, de valores (ver apéndice B)

$$V_c^{\text{effOT}_i}(r) = \left[ V_c^{\text{OT}_i}(r) (f_i^i)^2 + \frac{\hbar^2}{m} (\nabla f_i^i)^2 \right]$$

$$V_c^{\text{effIT}_i}(r) = \left[ \left( \frac{2}{3} V_c^{\text{IT}_i} + \frac{4}{3} V_T^{\text{IT}_i} - \frac{2}{3} V_{Ls}^{\text{IT}_i} + \frac{4}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right) (f_2^i)^2 + \left( \frac{4}{3} V_{Ls}^{\text{IT}_i} - \frac{8}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right) \frac{1}{2} f_2^i f_3^i \right. \\ \left. + \left( \frac{1}{3} V_c^{\text{IT}_i} - \frac{4}{3} V_T^{\text{IT}_i} - \frac{2}{3} V_{Ls}^{\text{IT}_i} + \frac{4}{3} \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} \right) (f_3^i)^2 + \frac{1}{3} \frac{\hbar^2}{m} \left[ 2 (\nabla f_2^i)^2 + (\nabla f_3^i)^2 \right] \right], \quad (E.8)$$

con  $i=+, -$ ;  $V_c^{\text{ST}+} = V_c^{10}, V_c^{01}$ ,  $V_c^{\text{ST}-} = V_c^{11}, V_c^{00}$ ;  $\mathcal{E}_k$ ,  $k=1, \dots, A$  las correspondientes energías monoparticulares del oscilador.

En resumen tenemos, pues, la energía del estado fundamental de cada núcleo expresada según

$$H_{00} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^A \mathcal{E}_k + 2\pi \int_0^{\infty} E(f_i^{\pm}(r), \frac{df_i^{\pm}}{dr}, i=1,2,3, \rho_{\pm}(r, n_p), V_c^{\text{eff}}(r)) dr, \quad (E.9)$$

que calcularemos como

$$H_{00} = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^A \mathcal{E}_k + 2\pi \int_0^{r_{\text{máx}}} E dr$$

$$E = 3(V_c^{\text{effT}_{10}} + V_c^{\text{effT}_{01}}) \rho_{+} + (9V_c^{\text{effT}_{11}} + V_c^{\text{effT}_{00}}) \rho_{-}, \quad (E.10)$$

ya que

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \rho_{\pm}(r, \eta_p) = 0 \quad (\text{E.11})$$

y podemos sustituir, por tanto, el límite superior infinito de la anterior integral por un valor  $r_{\text{máx}}$  tal que si  $r > r_{\text{máx}}$  el integrando se haga despreciable. Tal  $r_{\text{máx}}$  ha sido tomado como una distancia de 12 fermis.

Las funciones  $f_i^{\pm}(r)$ ,  $i=1,2,3$ , han de satisfacer además las condiciones de frontera

$$\left. \begin{aligned} f_i^{\pm}(r=c) &= 0 \\ f_i^{\pm}(r=r_{\text{máx}}) &= 1 \end{aligned} \right\}, \quad (\text{E.12})$$

siendo  $c$  la longitud del core del potencial  $V(12)$  utilizado, y que será 0 si el potencial es de soft core.

El correspondiente problema variacional se resolvería mediante el sistema de ecuaciones diferenciales de segundo orden

$$\frac{\partial E}{\partial f_i^{\kappa}} - \frac{\partial E}{\partial \left(\frac{df_i^{\kappa}}{dr}\right)} = 0; \quad i=1,2,3; \quad \kappa=+,- \quad , \quad (\text{E.13})$$

cuya solución contendría 6 parámetros a determinar mediante la imposición del anterior conjunto de condiciones.

Sin embargo, nosotros queremos resolver un problema variacional con restricciones: buscamos la solución del problema sujeta a una de las dos restricciones alternativas

i) condición secuencial:

$$\sum_{i,j} \langle ij | F_2^2(ij) - 1 | ij - ji \rangle \leq k_s \quad (\text{E.14})$$

ii) condición de Pauli:

$$\sum_{i,j} \langle ij | F_2(ij) - 1 | ij - ji \rangle \leq k_p \quad , \quad (\text{E.15})$$

por razones ya expuestas en el apartado 6.2 de esta memoria; además impondremos sobre las componentes  $f_i^{\pm}(r)$  las condiciones adicionales

$$\left. \frac{df_i^{\pm}}{dr} \right|_{r=d} = 0 \quad f_i^{\pm}(r \gg d) = 1, \quad (\text{E.16})$$

siendo  $d$  cierta distancia que denominaremos como de "healing". Nos encontramos, pues, ante un problema variacional con condiciones que debe ser resuelto mediante la introducción de los adecuados multiplicadores de Lagrange.

Dado que las funciones  $f_i^{\pm}(r)$  valen idénticamente 1 a partir de  $r=d$ , la contribución a la energía de interés para nosotros puede escribirse como la integral

$$\int_c^d E dr, \quad (\text{E.17})$$

sujeta a las condiciones

$$f_i^{\pm}(r=c) = 0 \quad (\text{E.18})$$

$$f_i^{\pm}(r=d) = 1$$

$$\left. \frac{df_i^{\pm}}{dr} \right|_{r=d} = 0 \quad (\text{E.19})$$

$$\langle F_2^2 - 1 \rangle \lesssim k_s, \quad (\text{E.20a})$$

la última de ellas alternable con la condición de Pauli

$$\langle F_2 - 1 \rangle \lesssim k_p. \quad (\text{E.20b})$$

Se tendrá, por tanto, el siguiente sistema de ecuaciones, resultante de aplicar las ecuaciones de Euler (E.13) al funcional

$$E^* = E + (3\lambda_1^+ f_1^{+2} + 2\lambda_2^+ f_2^{+2} + \lambda_3^+ f_3^{+2}) \rho_+ + (\lambda_1^- f_1^{-2} + 6\lambda_2^- f_2^{-2} + 3\lambda_3^- f_3^{-2}) \rho_-, \quad (\text{E.21})$$

donde se han introducido los multiplicadores de Lagrange que, conjuntamente con uno de los dos parámetros  $\hbar\omega$  (parámetro del oscilador) o  $d$  (distancia de healing), permitirán encontrar las soluciones que cumplen las condiciones impuestas:

Canales singlete ( $S=0$ ):

$T=1$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_i^+} = 6 V_c^{01} f_i^+ \rho_+ + 6 \lambda_i^+ f_i^+ \rho_+$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial \left(\frac{df_i^+}{dr}\right)} = 6 \frac{\hbar^2}{m} \frac{df_i^+}{dr} \rho_+ ; \quad \frac{d}{dr} \frac{\partial E^*}{\partial f_i^+} = 6 \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_i^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_i^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} \right)$$

$$V_c^{01} f_i^+ \rho_+ + \lambda_i^+ f_i^+ \rho_+ - \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_i^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_i^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} \right) = 0 ;$$

$$\frac{d^2 f_i^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_i^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} - \frac{m}{\hbar^2} f_i^+ (V_c^{01} + \lambda_i^+) \rho_+ = 0$$

$T=0$

(E.22)

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_i^-} = 2 V_c^{00} f_i^- \rho_- + 2 \lambda_i^- f_i^- \rho_-$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial \left(\frac{df_i^-}{dr}\right)} = 2 \frac{\hbar^2}{m} \frac{df_i^-}{dr} \rho_- ; \quad \frac{d}{dr} \frac{\partial E^*}{\partial f_i^-} = 2 \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_i^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_i^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} \right)$$

$$V_c^{00} f_i^- \rho_- + \lambda_i^- f_i^- \rho_- - \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_i^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_i^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} \right) = 0 ;$$

$$\frac{d^2 f_i^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_i^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} - \frac{m}{\hbar^2} f_i^- (V_c^{00} + \lambda_i^-) \rho_- = 0$$

(E.23)

Canales triplete (S=1):

T=0

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_1^+} = (2V_c^{10} + 4V_T^{10} - 2V_{L_3}^{10} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) 2f_1^+ \rho_+ + (4V_{L_3}^{10} - 8\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) f_3^+ \rho_+ + 4\lambda_2^+ f_2^+ \rho_+$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_2^+} = 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{df_2^+}{dr} \rho_+ ; \quad \frac{d}{dr} \left( \frac{\partial E^*}{\partial f_2^+} \right) = 4\frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_2^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_2^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} \right)$$

$$\frac{d^2 f_2^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_2^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{10} + 2V_T^{10} - V_{L_3}^{10} + 2\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_2^+) f_2^+ \rho_+ = \left( \frac{m}{\hbar^2} V_{L_3}^{10} - 2\frac{1}{r^2} \right) f_3^+ \rho_+$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_3^+} = (V_c^{10} - 4V_T^{10} - 2V_{L_3}^{10} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) 2f_3^+ \rho_+ + (4V_{L_3}^{10} - 8\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) f_2^+ \rho_+ + 2\lambda_3^+ f_3^+ \rho_+$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_3^+} = 2\frac{\hbar^2}{m} \frac{df_3^+}{dr} \rho_+ ; \quad \frac{d}{dr} \left( \frac{\partial E^*}{\partial f_3^+} \right) = 2\frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_3^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_3^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} \right)$$

$$\frac{d^2 f_3^+}{dr^2} \rho_+ + \frac{df_3^+}{dr} \frac{d\rho_+}{dr} - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{10} - 4V_T^{10} - 2V_{L_3}^{10} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_3^+) f_3^+ \rho_+ = \left( 2\frac{m}{\hbar^2} V_{L_3}^{10} - 4\frac{1}{r^2} \right) f_2^+ \rho_+$$

T=1

(E.24)

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_2^-} = (6V_c^{10} + 12V_T^{10} - 6V_{L_3}^{10} + 12\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) 2f_2^- \rho_- + (12V_{L_3}^{10} - 24\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) f_3^- \rho_- + 12\lambda_2^- f_2^- \rho_-$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_2^-} = 12\frac{\hbar^2}{m} \frac{df_2^-}{dr} \rho_- ; \quad \frac{d}{dr} \left( \frac{\partial E^*}{\partial f_2^-} \right) = 12\frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_2^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_2^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} \right)$$

$$\frac{d^2 f_2^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_2^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{10} + 2V_T^{10} - V_{L_3}^{10} + 2\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_2^-) f_2^- \rho_- = \left( \frac{m}{\hbar^2} V_{L_3}^{10} - 2\frac{1}{r^2} \right) f_3^- \rho_-$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_3^-} = (3V_c^{10} - 12V_T^{10} - 6V_{L_3}^{10} + 12\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) 2f_3^- \rho_- + (12V_{L_3}^{10} - 24\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2}) f_2^- \rho_- + 6\lambda_3^- f_3^- \rho_-$$

$$\frac{\partial E^*}{\partial f_3^-} = 6\frac{\hbar^2}{m} \frac{df_3^-}{dr} \rho_- ; \quad \frac{d}{dr} \left( \frac{\partial E^*}{\partial f_3^-} \right) = 6\frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{d^2 f_3^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_3^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} \right)$$

$$\frac{d^2 f_3^-}{dr^2} \rho_- + \frac{df_3^-}{dr} \frac{d\rho_-}{dr} - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{10} - 4V_T^{10} - 2V_{L_3}^{10} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_3^-) f_3^- \rho_- = \left( 2\frac{m}{\hbar^2} V_{L_3}^{10} - 4\frac{1}{r^2} \right) f_2^- \rho_-$$

(E.25)

Con el fin de facilitar la resolución numérica de estas ecuaciones,

a continuación haremos un cambio en ellas de función incógnita que las lleve a tomar la forma canónica de ecuaciones diferenciales de segundo orden sin término en derivada primera. Definamos para ello unas nuevas funciones incógnitas  $\bar{f}_i^\pm(r)$  dadas por

$$\bar{f}_i^\pm(r) = \rho_\pm^{1/2} f_i^\pm(r) , \quad i = 1, 2, 3 , \quad (E.26)$$

que deberán satisfacer, por tanto, las condiciones:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d\bar{f}_i^\pm}{dr} \right|_{r=d} &= \frac{1}{2} \frac{d\rho_\pm}{dr} \rho_\pm^{-1/2} f_i^\pm + \rho_\pm^{1/2} \left. \frac{df_i^\pm}{dr} \right|_{r=d} = \frac{1}{2} \rho_\pm^{-1/2} \left. \frac{d\rho_\pm}{dr} \right|_{r=d} \\ \bar{f}_i^\pm(r=c) &= 0 \\ \bar{f}_i^\pm(r \gg d) &= \rho_\pm^{1/2}(r) \end{aligned} \quad (\text{E.27})$$

Introduciendo este cambio llegamos finalmente al resultado:

$$\begin{aligned} \bar{f}_i^\pm(r) &= \rho_\pm^{1/2}(r) f_i^\pm(r) \\ f_i^\pm(r) &= \rho_\pm^{-1/2}(r) \bar{f}_i^\pm(r) \\ \frac{df_i^\pm}{dr} &= \rho_\pm^{-1/2} \frac{d\bar{f}_i^\pm}{dr} - \frac{1}{2} \rho_\pm^{-3/2} \frac{d\rho_\pm}{dr} \bar{f}_i^\pm \\ \frac{d^2 f_i^\pm}{dr^2} &\Rightarrow \frac{3}{4} \rho_\pm^{-5/2} \left( \frac{d\rho_\pm}{dr} \right)^2 \bar{f}_i^\pm - \frac{1}{2} \rho_\pm^{-3/2} \frac{d^2 \rho_\pm}{dr^2} \bar{f}_i^\pm - \rho_\pm^{-3/2} \frac{d\rho_\pm}{dr} \frac{d\bar{f}_i^\pm}{dr} + \rho_\pm^{-1/2} \frac{d^2 \bar{f}_i^\pm}{dr^2} \end{aligned} \quad (\text{E.28})$$

De esta forma, las nuevas ecuaciones son ahora:

Canales singlete (S=0):

T=1

$$\frac{d^2 \bar{f}_i^+}{dr^2} + \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_+} \frac{d^2 \rho_+}{dr^2} + \frac{1}{4} \frac{1}{\rho_+^2} \left( \frac{d\rho_+}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{01} + \lambda_i^+) \right] \bar{f}_i^+ = 0 \quad (\text{E.29})$$

T=0

$$\frac{d^2 \bar{f}_i^-}{dr^2} + \left[ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_-} \frac{d^2 \rho_-}{dr^2} + \frac{1}{4} \frac{1}{\rho_-^2} \left( \frac{d\rho_-}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} (V_c^{00} + \lambda_i^-) \right] \bar{f}_i^- = 0 \quad (\text{E.30})$$

Canales triplete (S=1):

T=0

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \bar{f}_2^+}{dr^2} + \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_+} \frac{d^2 \rho_+}{dr^2} + \frac{1}{4} \left( \frac{d\rho_+}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} \left[ V_c^{10} + 2V_T^{10} - V_{L5}^{10} + 2\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_2^+ \right] \right\} \bar{f}_2^+ &= \left[ \frac{m}{\hbar^2} V_{L5}^{10} - 2\frac{1}{r^2} \right] \bar{f}_3^+ \\ \frac{d^2 \bar{f}_3^+}{dr^2} + \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_+} \frac{d^2 \rho_+}{dr^2} + \frac{1}{4} \left( \frac{d\rho_+}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} \left[ V_c^{10} - 4V_T^{10} - 2V_{L5}^{10} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_3^+ \right] \right\} \bar{f}_3^+ &= \left[ 2\frac{m}{\hbar^2} V_{L5}^{10} - \frac{4}{r^2} \right] \bar{f}_2^+ \end{aligned} \right\} \quad (E.31)$$

T=1

$$\left. \begin{aligned} \frac{d^2 \bar{f}_2^-}{dr^2} + \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_-} \frac{d^2 \rho_-}{dr^2} + \frac{1}{4} \left( \frac{d\rho_-}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} \left[ V_c^{11} + 2V_T^{11} - V_{L5}^{11} + 2\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_2^- \right] \right\} \bar{f}_2^- &= \left[ \frac{m}{\hbar^2} V_{L5}^{11} - \frac{2}{r^2} \right] \bar{f}_3^- \\ \frac{d^2 \bar{f}_3^-}{dr^2} + \left\{ -\frac{1}{2} \frac{1}{\rho_-} \frac{d^2 \rho_-}{dr^2} + \frac{1}{4} \left( \frac{d\rho_-}{dr} \right)^2 - \frac{m}{\hbar^2} \left[ V_c^{11} - 4V_T^{11} - 2V_{L5}^{11} + 4\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{r^2} + \lambda_3^- \right] \right\} \bar{f}_3^- &= \left[ \frac{m}{\hbar^2} V_{L5}^{11} - \frac{4}{r^2} \right] \bar{f}_2^- \end{aligned} \right\} \quad (E.32)$$

Obtenemos, en resumen, una ecuación diferencial de segundo orden para cada canal singlete de espín, y un sistema de dos ecuaciones acopladas de segundo orden para cada canal triplete. Su resolución, con las condiciones impuestas, nos determina las funciones radiales  $f_1^\pm(r)$  componentes de la correlación usada en cada núcleo.

**BIBLIOGRAFIA.**

- (AFN68) Afnan, I.R. y Tang, Y.C., Phys. Rev. 175(1968)1337.
- (AFN69) Afnan, I.R. y Tang, Y.C., Phys. Rev. 186(1969)984.
- (AJZ75) Ajzenberg-Selove, F., Nucl. Phys. A248(1975)1.
- (AJZ76) Ajzenberg-Selove, F., Nucl. Phys. A268(1976)1.
- (AJZ77) Ajzenberg-Selove, F., Nucl. Phys. A281(1977)1.
- (AJZ79) Ajzenberg-Selove, F., Nucl. Phys. A320(1979)1.
- (ANA78) Anastasio, M.R., Faessler, A., Muther, H., Holinde, K.  
y Machleidt, R. Phys. Rev. C18(1978)2416.
- (AVI58) Aviles, J.B., Ann. Phys. 5(1958)251.
- (BAC69) Backman, S.O., Chakkalakal, D.A. y Clark, J.W., Nucl.  
Phys. A130(1969)635.
- (BET63) Bethe, H.A., Brandow, B.H., Petschek, A.G., Phys. Rev.  
129(1963)225.
- (BET71) Bethe, H.A., Ann. Rev. Nucl. Sci. 21(1971)93.
- (BIE65) Biedenharn y Dom, H. van., Quantum Theory of angular  
momentum, Academic Press, N. Y, 1965.
- (BIS78) Bishop, R.F., Howes, C., Irvine, J.M. y Modarres, M.,  
J. Phys. G4(1978).
- (BRI67) Brink, D.M. y Boeker, E. Nucl. Phys. A91(1967)1.
- (BRO60) Brody, T.A. y Moshinsky, M., Table of Transformation  
Brackets, Monograf. Inst. Fis., México, 1960.
- (BRU54) Brueckner, K.A. et al., Phys. Rev. 95(1954)2170.
- (BRU55) Brueckner, K.A. y Levinson, C.A., Phys. Rev.  
97(1955)1344.
- (BRU77) Brussaard, P.J. y Glaudemans, P.W.M., Shell model  
applications in nuclear spectroscopy, North-Holland,  
Amsterdam, 1977.
- (CIO80) Ciofi, C., en Progress in Particle and Nuclear Physics,

- vol. 4., ed. D.H. Wilkinson, Pergamon, Oxford, 1980.
- (CLA66a) Clark, J.W. y Westhaus, P., Phys. Rev. 141(1966)833.
- (CLA66b) Clark, J.W. y Westhaus, P., Phys. Rev. 149(1966)990.
- (CLA68) Clark, J.W. y Westhaus, P., J. Math. Phys.  
9(1968)131, 149.
- (CLA70) Clark, J.W y Ristig, M.L., Nuov. Cim. 70A(1970)313.
- (CLA72) Clark, J.W. y Ristig, M.L., Phys. Rev. C5(1972)1553.
- (CLA79a) Clark, J.W., en Progress in Particle and Nuclear Physics,  
vol. 2, ed. D. H. Wilkinson, Pergamon, Oxford, 1979.
- (CLA79b) Clark, J.W., Mead, L.R., Krotscheck, E., Kurten, K.E. y  
Ristig, M.L., Nucl. Phys. A328(1979)45.
- (CLA79c) Clark, J.W., Nucl. Phys. A328(1979)587.
- (CLA80) Clark, J.W., Lect. Not. in Phys. 138(1980)184.
- (CLA81) Clark, J.W., en The Many Body Problem: Jastrow  
correlations versus Brueckner Theory, pág. 184, Springer,  
Berlín, 1981.
- (DAB58a) Dabrowski, J., Proc. Phys. Soc. 71(1958)658.
- (DAB58b) Dabrowski, J., Proc. Phys. Soc. 72(1958)499.
- (DAV69) Davies, K.T.R., Baranger, M., Tarbutton, R.M. y Kuo, T.T.S.,  
Phys. Rev. 177(1969)1519.
- (DAY67) Day, B.D., Rev. Mod. Phys. 39(1967)719.
- (DAY79) Day, B.D., Nucl. Phys. A328(1979)1.
- (DRE53) Drell, S.D. y Huang, K. Phys. Rev. 91(1953)1527.
- (EIS72) Eisenberg, J.M. y Greiner, W., Microscopic Theory of the  
Nucleus, North-Holland, Amsterdam, 1972.
- (FAE81) Faessler, A., en The Many Body Problem: Jastrow  
correlations versus Brueckner Theory, págs. 120 y 153,  
Springer, Berlín, 1981.

- (FAN72) Fantoni, S. y Rosati, S., Nuov. Cim. 10A(1972)145.
- (FAN75) Fantoni, S. y Rosati, S., Nuov. Cim. 25A(1975)593.
- (FAN79) Fantoni, S. y Rosati, S., Nucl. Phys. A328(1979)478.
- (FEE59) Feenberg, E. y Clark, J.W., Phys. Rev. 113(1959)388.
- (FEE65) Feenberg, E. y Woo, C.W., Phys. Rev. 137(1965)A391.
- (FEE69) Feenberg, E., Theory of Quantum Fluids, Academic Press, New York, 1969.
- (GAM57) Gammel, J.L., Christian, R.S., Thaler, R.M., Phys. Rev. 105(1957)311.
- (GAU71) Gaudin, M., Gillespie, J. y Ripka, G., Nucl. Phys. A176(1971)237.
- (GIR65) Giraud, B., Nucl. Phys. 71(1965)373.
- (GLA64) Glaudemans, P.W.M., Wiechers, G. y Brussaard, P.J., Nucl. Phys. 56(1964)529.
- (GOL57) Goldstone, J., Proc. Roy. Soc. (London) A239(1957)267.
- (GUA79) Guardiola, R., Nucl. Phys. A328(1979)490.
- (GUA80) Guardiola, R. y Polls, A., Nucl. Phys. A342(1980)385.
- (GUA81a) Guardiola, R., Lect. Not. in Phys. 142(1981)398.
- (GUA81b) Guardiola, R., Faessler, A., Muther, H. y Polls, A., Nucl. Phys. A371(1981)79.
- (GUA81c) Guardiola, R., en The Many Body Problem: Jastrow correlations versus Brueckner Theory, pág. 340, Springer, Berlín, 1981.
- (GUA81d) Guardiola, R., Nucl. Phys. A384(1982)143.
- (HAM62) Hamada, T. y Johnston, I.D., Nucl. Phys. 34(1962)382.
- (HAR58) Hartogh, C.D. y Tolhoek, H.A., Physica 24(1958)721, 875, 896.
- (HOW78a) Howes, C., Bishop, R.F., Irvine, J.M., J. Phys.

G4(1978)L89.

(HOW78b)Howes, C., Bishop, R.F., Irvine, J.M., J. Phys.

G4(1978)L123.

(IRV72) Irvine, J.M., Nuclear Structure Theory, Pergamon Press.,  
1972.

(IRV76) Irvine, J.M. et al., Ann. of Phys. 102(1976)129-155.

(IWA57) Iwamoto, F. y Yamada, M., Prog. Theor. Phys. 17(1957)543.

(JAS51) Jastrow, R., Phys. Rev. 81(1951)165.

(JAS55) Jastrow, R., Phys. Rev. 98(1955)1479.

(KAL64) Kallio, A. y Kolltveit, K., Nucl. Phys. 53(1964)87.

(KAM61) Kampen, van N.G., Physica 27(1961)783.

(KRO75) Krotscheck, E., Ristig, M.L., Nucl. Phys. A242(1975)389.

(KRO79) Krotscheck, E. y Clark, J.W., Nucl. Phys. A328(1979)73.

(KUR78) Kurten, K.E., Ristig, M.L. y Clark, J.W., Phys. Lett.

74B(1978)153.

(KUR79) Kurten, K.E., Ristig, M.L. y Clark, J.W., Nucl. Phys.

A317(1979)87.

(LAW80) Lawson, R.D., Theory of the Nuclear Shell Model,

Clarendon, N. Y., 1980.

(LEE59) Leeuwen, J. van, Groeneveld, J. , Boer, J. de, Physica

25(1959)792.

(MAH81) Mahaux, C., en The Many Body Problem: Jastrow correlations

versus Brueckner Theory, pág. 50, Springer, Berlín, 1981.

(MEA80) Mead, L.R. y Clark, J.W., Phys. Lett. 90B(1980)331.

(MOS59) Moshinsky, M. Nucl. Phys. 13(1959)104.

(MUE70) Mueller, G.P. y Clark, J.W., Nucl. Phys. A155(1970)561.

(MUT75) Muther, H., Faessler, A. y Tripathi, R.K., Nucl. Phys.

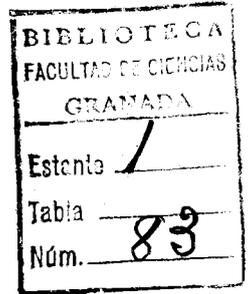
A255(1975)132.

- (OHM56) Ohmura, T., Morita, M. y Yamada, M., Prog. Theor. Phys.  
15(1956)222.
- (OWE76a)Owen, J.C., Bishop, R.F., Irvine, J.M., Nucl. Phys.  
A274(1976)108.
- (OWE76b)Owen, J.C., Bishop, R.F., Irvine, J.M., Ann. of Phys.  
102(1976)170.
- (OWE76c)Owen, J.C., Bishop, R.F., Irvine, J.M., Phys. Lett.  
61B(1976)147.
- (OWE77) Owen, J.C., Bishop, R.F., Irvine, J.M., Nucl. Phys.  
A277(1977)45.
- (PAN71a)Pandharipande, V.R., Nucl. Phys. A178(1971)123.
- (PAN71b)Pandharipande, V.R., Nucl. Phys. A174(1971)641.
- (PAN72) Pandharipande, V.R., Nucl. Phys. A181(1972)33.
- (PAN74) Pandharipande, V.R., Nucl. Phys. A231(1974)257.
- (PAN79) Pandharipande, V.R. y Wirinja, R.B., Rev. Mod. Phys.  
51(1979)821.
- (PHI73) Philhps, G.M. y Taylor, P.J., Theory and applications of  
numerical analysis, Academic Press. London, 1973.
- (PRE75) Preston, M.A. y Bhaduri, R.K., Structure of the Nucleus,  
Addison-Wesley, 1975.
- (REI68) Reid, R.V., Ann. of. Phys. 50(1968)411.
- (RIP68) Ripka, G., Advanc. in Nucl. Phys., vol. 1 (1968).
- (RIS71) Ristig, M.L., Ter Low, W.J. y Clark, J.W., Phys. Rev.  
C3(1971)1504.
- (RIS72) Ristig, M.L., Terlow, W.J. y Clark, J.W., Phys. Rev.  
C5(1972)695.
- (ROS81) Rosati, S., en The Many Body Problem: Jastrow correlations  
versus Brueckner Theory, pág. 1, Springer, Berlín, 1981.

- (ROW70) Rowe, D.J., Nuclear Collective Motions, Methuen,  
Londres, 1970.
- (SAU69) Sauer, P.U. et. al., Nucl. Phys. A125(1969)257.
- (SAU70) Sauer, P.U., Nucl. Phys. A150(1970)467.
- (TAL52) Talmi, I., Helv. Phys. Acta 25(1952)185.
- (TRI74) Tripathi, R.K., Faessler, A. y Murther, H., Phys. Rev. C10(1974)  
2080.
- (WAR79) Warke, C.S. y Gunye, M.R., Journ. Phys. A7(1979)718.
- (ZAB74) Zabolitzky, J.G., Nucl. Phys. A228(1974)272.

**INDICE.**

0. <u>INTRODUCCION</u> .....	6
1. <u>ASPECTOS GENERALES DE LA TEORIA CBF</u> .....	13
1.1. Interacción nucleón-nucleón .....	15
1.2. Función de ondas. Factor de correlación .....	17
1.3. Problema generalizado de valores propios .....	21
2. <u>EVALUACION DE ELEMENTOS DE MATRIZ EN LA BASE</u>	
<u>CORRELACIONADA</u> .....	23
2.0. Introducción .....	25
2.1. Desarrollo FAHT .....	28
2.1.1. Elementos diagonales .....	32
2.1.2. Elementos no diagonales .....	32
2.2. Desarrollo CIY .....	33
2.2.1. Elementos diagonales .....	33
2.2.2. Elementos no diagonales .....	33
3. <u>CONSTRUCCION DE LA BASE NO CORRELACIONADA</u> .....	34
4. <u>ELEMENTOS DE MATRIZ ENTRE FUNCIONES DE LA BASE NO</u>	
<u>CORRELACIONADA: REDUCCION A ELEMENTOS DE MATRIZ DE DOS</u>	
<u>PARTICULAS</u> .....	40
5. <u>POTENCIAL EFECTIVO Y ELEMENTOS DE MATRIZ DE DOS</u>	
<u>PARTICULAS</u> .....	54
5.0. Introducción .....	56
5.1. Determinación del potencial efectivo .....	56
5.1.0. Introducción .....	56
5.1.1. Término asociado a la energía potencial .....	58



5.1.2. Término asociado a la energía cinética ... ..	59
5.1.3. Término asociado a la energía total ... ..	60
5.1.4. Término asociado a la norma de los estados ...	60
5.2. Cálculo de los elementos de matriz del potencial	
efectivo entre los estados de dos partículas ... ..	61
5.2.1. Componentes centrales, tensoriales y espín-órbita	
para el potencial efectivo CIY ... ..	61
5.2.2. Término adicional para la FAHT ... ..	65
6. <u>DETERMINACION DE LA CORRELACION</u> ... ..	68
6.0. Introducción ... ..	70
6.1. Valor esperado de un potencial a dos cuerpos en el	
estado fundamental ... ..	71
6.2. Ecuaciones de Euler-Lagrange ... ..	76
7. <u>RESULTADOS.</u> ... ..	83
7.0. Introducción ... ..	85
7.1. Estados fundamentales ... ..	86
7.2. Estados excitados ... ..	94
-Tablas ... ..	102
-Figuras ... ..	110
8. <u>CONCLUSIONES</u> ... ..	163
- <u>APENDICES</u> ... ..	166
Apéndice A ... ..	167
Apéndice B ... ..	195
Apéndice C ... ..	205
Apéndice D ... ..	223
Apéndice E ... ..	238
- <u>BIBLIOGRAFIA</u> ... ..	247



Biblioteca Universitaria de Granada



01037512