

---

---

ESTUDIO DE LA TEORÍA BCS Y SU  
APLICACIÓN EN NÚCLEOS SUPERCONDUCTORES

---

---

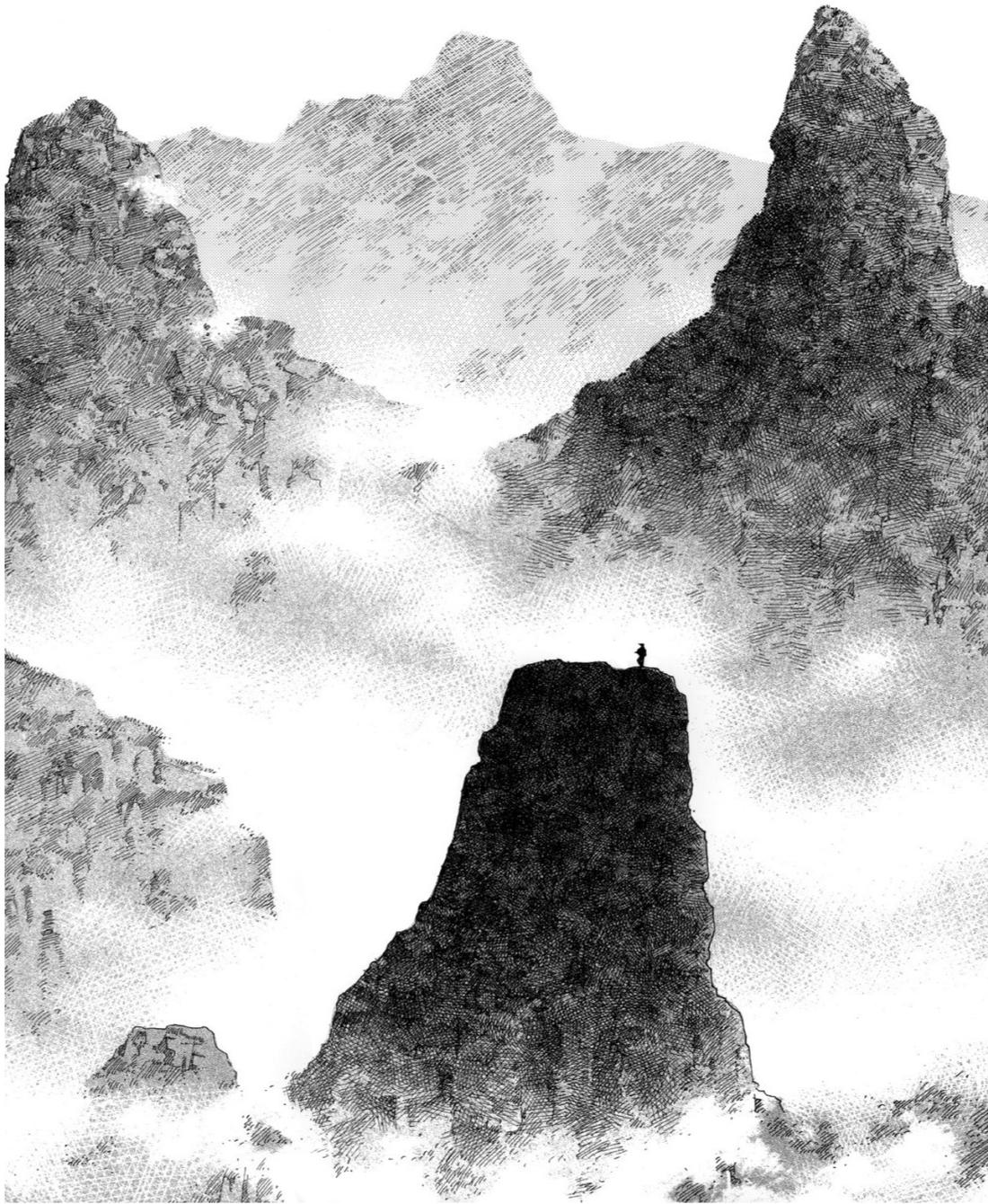
TESIS DE GRADO PARA OPTAR POR EL TÍTULO DE LICENCIADO EN FÍSICA

AUTOR: JULIÁN F. GELABERT

DIRECTOR: RODOLFO M. ID BETAN

*Universidad Nacional de Rosario*  
*Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura*  
*Escuela de Ciencias Exactas y Naturales*  
*Departamento de Física*





*“All men are the same except for their belief in their own selves, regardless of what others may think of them.”*

– “The Book of Five Rings”, Miyamoto Musashi



# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>IV</b>
<b>Resumen</b>	<b>v</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
1.1 Tabla de nucleidos . . . . .	2
1.2 Línea de goteo . . . . .	3
1.3 Apareamiento de nucleones . . . . .	5
<b>2 Modelo de Capas</b>	<b>7</b>
2.1 Campo medio nuclear . . . . .	8
2.2 Potenciales fenomenológicos . . . . .	10
2.3 Configuraciones de muchos nucleones . . . . .	10
2.4 Hamiltoniano nuclear . . . . .	12
2.4.1 Segunda cuantización . . . . .	12
2.4.2 Núcleos de dos partículas . . . . .	15
2.4.3 Interacción de apareamiento puro . . . . .	17

<b>3</b>	<b>Teoría BCS</b>	<b>19</b>
3.1	Estado fundamental . . . . .	20
3.2	Formalismo de cuasipartículas . . . . .	21
3.3	Ecuaciones BCS . . . . .	23
3.3.1	BCS como un problema variacional . . . . .	24
3.3.2	Derivación de las ecuaciones BCS . . . . .	25
3.3.3	Interpretación física de parámetros básicos . . . . .	28
3.4	El programa BCSCONT . . . . .	30
3.4.1	Parámetros de los potenciales . . . . .	30
<b>4</b>	<b>Aplicación a la cadena del estaño</b>	<b>31</b>
4.1	Representación partícula simple . . . . .	32
4.2	Gap de energía . . . . .	33
4.3	Simetría partícula-agujero . . . . .	36
4.4	Energías efectivas de partícula simple . . . . .	40
4.5	Nivel de Fermi . . . . .	41
4.6	Cuasienergías y probabilidades de ocupación . . . . .	42
4.7	Energía de ligadura y energías de separación de neutrones . . . . .	46
<b>5</b>	<b>Aplicación a la cadena del níquel</b>	<b>50</b>
5.1	Representación de partícula simple . . . . .	51

5.2	Gap de energía . . . . .	52
5.3	Energías efectivas de partícula simple . . . . .	53
5.4	Nivel de Fermi . . . . .	54
5.5	Cuasienergías y probabilidades de ocupación . . . . .	54
5.6	Energía de ligadura y energías de separación de neutrones . . . . .	57
<b>6</b>	<b>Formalismo de Gorkov</b>	<b>61</b>
6.1	Representaciones . . . . .	62
6.2	Funciones de Green . . . . .	65
6.3	Ecuaciones de Gorkov . . . . .	66
6.4	Soluciones algebraicas de las ecuaciones de movimiento . . . . .	67
6.5	Observables . . . . .	70
<b>7</b>	<b>Conclusiones y proyecciones</b>	<b>73</b>
	<b>Apéndice</b>	<b>75</b>
A	Representación del Hamiltoniano nuclear en cuasipartículas . . . . .	75
B	Deducción de las ecuaciones (6.27) y (6.28) de la Sección 6.3 . . . . .	79
C	Evaluación de la función de Green anómala a tiempos iguales . . . . .	82
	<b>Bibliografía</b>	<b>83</b>

# Agradecimientos

En primer lugar, a mi familia, por haberme permitido llevar una vida cómoda hasta ahora y por haberme brindado su apoyo incondicional en todo lo que me propuse. A la Fer, por su compañía durante tantos años.

A mi director Rolo, por su dedicación y paciencia en guiarme durante todo el proceso de investigación. Sus conocimientos, sugerencias y comentarios fueron invaluable para mi formación.

A Naza, por su amor, apoyo incondicional, comprensión y motivación. Siempre estuvo presente para escucharme, animarme y celebrar cada logro en mi camino.

A mis amigxs, por sus palabras y gestos de aliento que me ayudaron a superar momentos difíciles y a disfrutar los buenos. En particular a Tomi, Luz y Nacho, quienes me acompañaron desde que tengo memoria. A Gino, y a tantas otras personas que tuve la dicha de conocer.

A mis compañerxs de facultad, por su compañía, aliento y distracciones que me permitieron recargar energías para seguir adelante.

A mis profesores, por su dedicación y pasión, incluso durante tiempos difíciles.

A la Universidad Nacional de Rosario, por innumerables oportunidades brindadas.

# Resumen

Esta tesis de grado aborda la aplicación de la teoría BCS en el estudio de los núcleos atómicos. La teoría BCS es una teoría bien establecida que describe la superconductividad en materiales sólidos, pero también ha encontrado aplicaciones exitosas en la física nuclear.

La teoría de capas se utiliza como punto de partida en el desarrollo de la teoría BCS. El formalismo de cuasipartículas se utiliza para representar la interacción entre los nucleones. A partir de esta representación del Hamiltoniano nuclear, se deducen las ecuaciones BCS. Estas ecuaciones describen cómo los nucleones se emparejan en pares análogos a los pares de Cooper.

En esta tesis de grado se utilizaron isótopos del estaño y del níquel en la línea de goteo de neutrones como sistemas modelo para estudiar los efectos de la BCS. Se calcularon observables como el nivel de Fermi, probabilidades de ocupación y las energías de separación de neutrones. Los cálculos se realizaron utilizando el código computacional BCSCONT, que es un programa de producción local para estudiar sistemas complejos de muchos nucleones.

Finalmente, se discute una alternativa de la teoría BCS mediante el formalismo de Gor'kov de funciones de Green. Este formalismo es una herramienta teórica esencial para describir estructuras y dinámica de núcleos atómicos.



# Capítulo 1

## Introducción

La física nuclear es una disciplina que ha evolucionado desde la observación de la radioactividad hasta la investigación actual sobre la estructura de los núcleos atómicos y las reacciones nucleares. Desde sus inicios a principios del siglo XX, la física nuclear ha sido un campo de investigación fundamental para el desarrollo de la tecnología moderna. A partir de la década de 1930, la física nuclear se convirtió en una ciencia separada y comenzó a enfocarse en el estudio de los núcleos atómicos y sus interacciones.

La complejidad de los sistemas interactuantes de muchas partículas ha dado lugar a una gran cantidad de teorías que describen la estructura del núcleo atómico. En el presente trabajo, se utilizará el Modelo de Capas para investigar núcleos dentro de la llamada *línea de goteo de neutrones*. Esta teoría se basa en la idea de que los nucleones dentro de un núcleo ocupan diferentes niveles de energía, como electrones en un átomo. El modelo de capas ha sido crucial para explicar el comportamiento de protones y neutrones dentro de núcleos atómicos.

El apareamiento de nucleones es otro fenómeno importante en la física nuclear. Este fenómeno se refiere a la tendencia de los protones y los neutrones a aparearse en pares dentro del núcleo, lo que aumenta la estabilidad del mismo. La teoría BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) fue desarrollada para explicar la superconductividad en los materiales a partir del apareamiento de electrones

cerca del nivel de Fermi [1]. Esta teoría se ha extendido al estudio de los núcleos atómicos, donde ha permitido describir cómo la formación de pares de nucleones lleva a un sistema a un estado de energía más bajo que la de nucleones individuales. La teoría BCS ha explicado fenómenos como la energía de excitación colectiva y las secciones eficaces de dispersión, así como contribuir al desarrollo de otras teorías de estructura nuclear como la teoría de Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) [2].

En el Capítulo 1 de esta tesis de grado se brinda una descripción breve de la tabla de nucleidos, la línea de goteo y el apareamiento de nucleones. En el Capítulo 2, se describe el Modelo de Capas, que es la base para los cálculos de este trabajo, y se describe la representación de número de ocupación, que permite describir el estado cuántico de un sistema de muchas partículas. En el Capítulo 3, se desarrolla la teoría BCS para el estudio de núcleos superconductores y se introduce el concepto de cuasipartícula, indispensable para este modelo. En los Capítulos 4 y 5, se aplica lo discutido hasta el momento a isótopos de estaño y del níquel, respectivamente, comparando los resultados numéricos con datos teóricos y experimentales. El Capítulo 6 introduce el formalismo de Gorkov, el cual incorpora el apareamiento en el formalismo de funciones de Green. Finalmente, el Capítulo 7 concluye este trabajo y presenta perspectivas a futuro.

## 1.1. Tabla de nucleidos

La tabla de nucleidos es una representación gráfica que muestra todas las combinaciones posibles de protones y neutrones que pueden formar un núcleo atómico estable o inestable. Cada punto en la tabla representa un núcleo específico con un número de protones y neutrones dado [3]. La tabla de nucleidos es una herramienta útil para los físicos nucleares, ya que permite predecir la estabilidad de un núcleo y entender cómo se producen las reacciones nucleares.

Los núcleos atómicos son de gran importancia en medicina nuclear, investigación científica y tecnología de energía nuclear. En la medicina nuclear, los nucleidos se utilizan para producir imágenes y tratar enfermedades. En la investigación científica, los neutrones son utilizados para

estudiar la estructura de la materia. En la tecnología de energía nuclear, se utilizan en reacciones de fisión para producir energía.

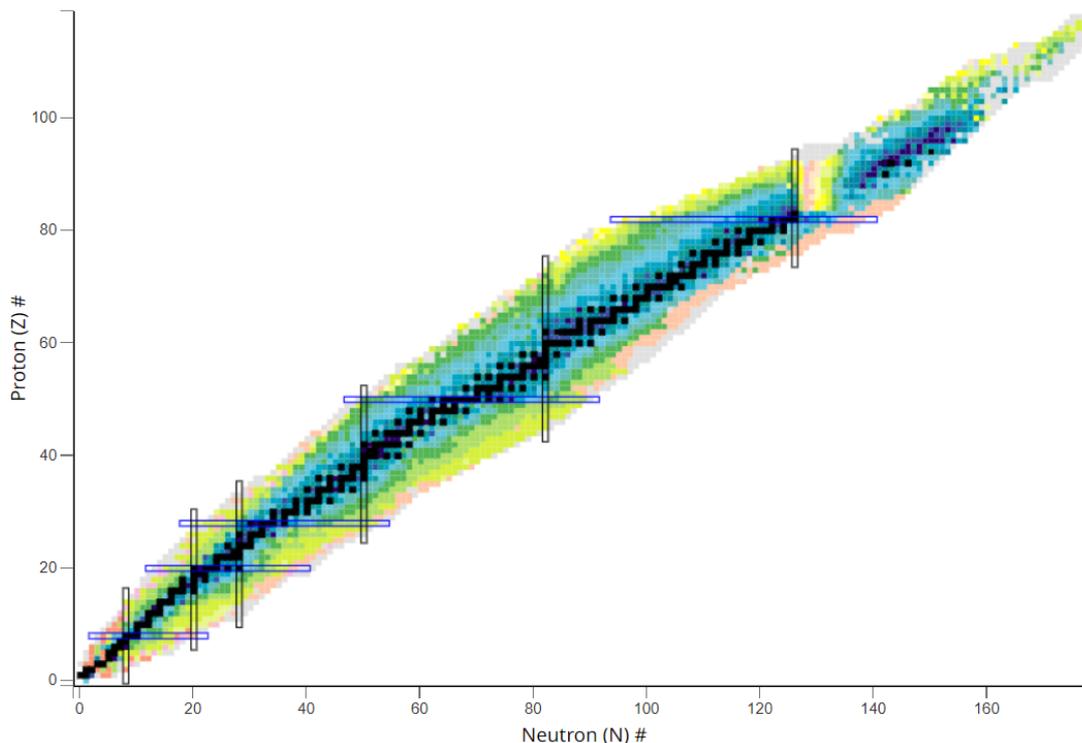


Figura 1.1: Tabla de nucleidos. Los colores representan escalas de tiempo de vida medio. Fuente [4].

La Figura 1.1 contiene la tabla de nucleidos. El código de color refiere a la estabilidad de un dado núcleo: el color negro corresponde a núcleos estables, el resto de colores a núcleos inestables. Un núcleo inestable eventualmente atravesará una reacción nuclear emitiendo partículas (decaimiento alfa, beta o gamma) y convirtiéndose en un núcleo estable.

## 1.2. Línea de goteo

Se observa que el exceso relativo entre protones y neutrones produce inestabilidad en los núcleos, lo que eventualmente los convierte completamente inestables. Para los isótopos con un número alto de neutrones, el límite en el cual la adición de un neutrón genera una configuración

nuclear inestable se conoce como *neutron drip line* (línea de goteo de neutrones, por su traducción del inglés). La *neutron drip line* se define en términos de la *energía de ligadura*  $B$  la cual es la energía necesaria para extraer un neutrón de un núcleo. Cuando se mide la *energía de separación de un neutrón*

$$S_n(N, Z) = B(Z, N) - B(Z, N - 1) \quad (1.1)$$

donde  $Z$  y  $N$  son el número de protones y neutrones del núcleo, respectivamente, se observa que cuando ocurre un cambio de signo en  $S_n$  el núcleo atómico encuentra un estado más energéticamente favorable emitiendo un nucleón. Se dice entonces que el núcleo comienza a "gotear" neutrones, debido a que energéticamente es favorable para el núcleo rechazar el nucleón que mantenerlo ligado. Análogamente, se definen la línea de goteo de protones y la energía de separación de un protón, aunque estos conceptos exceden el alcance de este trabajo y sólo son mencionados por complementitud.

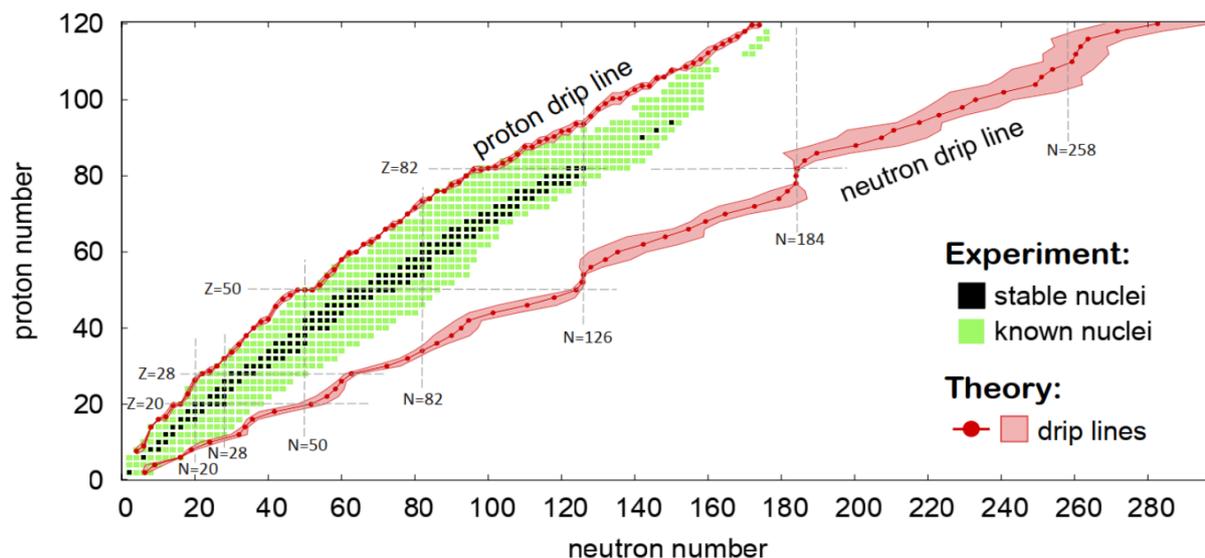


Figura 1.2: Líneas de goteo de protones y neutrones. Las incertezas se obtuvieron promediando diferentes métodos teóricos. Fuente [5].

En general, la línea de goteo se desplaza hacia la derecha a medida que aumenta el número atómico, ya que la repulsión Coulomb entre protones se vuelve más fuerte, lo que dificulta estabilizar elementos más pesados con un gran número de protones (ver Figura 1.2). Esto es por qué

muchos de los elementos más allá de la línea de goteo aún no han sido descubiertos o sintetizados, ya que son altamente inestables y difíciles de producir en el laboratorio.

El estudio de la línea de goteo y las propiedades de los núcleos más allá es un área activa de investigación en física nuclear y es de gran importancia para comprender la estructura fundamental de la materia y los orígenes de los elementos en el universo.

### 1.3. Apareamiento de nucleones

En un núcleo atómico, los nucleones interactúan a través de una fuerza nuclear fuerte, de corto alcance y atractiva que contribuye tanto al potencial del modelo de capas como a la interacción residual entre los nucleones. Dos neutrones (o dos protones) pueden aprovechar mejor la interacción residual para minimizar su energía moviéndose en órbitas inverso-temporales, es decir, estados con el mismo momento angular total  $j$  pero con proyecciones del momento angular total  $m$  opuestas [6]. El momento angular total de la pareja es nulo.

El estado fundamental de un núcleo con un número par de neutrones y protones se obtiene acoplando nucleones similares en estados con energías cercanas a la energía de Fermi para formar pares con momento angular cero. Los estados excitados se forman rompiendo los pares, y los estados más bajos se construyen rompiendo un par [6]. Estos estados tienen una energía de excitación de aproximadamente  $2\Delta$  que es la energía de ligadura del par (ver Figura 1.3). La cantidad  $\Delta$  se denomina gap de apareamiento o gap de energía, y puede ser obtenida a partir de la energía de ligadura  $B$  o la energía de separación de un neutrón  $S_n$  usando (1.1)

$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{4}[2S_n(N, Z) - S_n(N - 1, Z) - S_n(N + 1, Z)] \\ &= \frac{1}{4}[B(N - 2, Z) - 3B(N - 1, Z) + 3B(N, Z) - B(N + 1, Z)],\end{aligned}\tag{1.2}$$

donde  $N$  es par.

Como se ve en la Figura 1.3, el estado fundamental se obtiene llenando los orbitales más

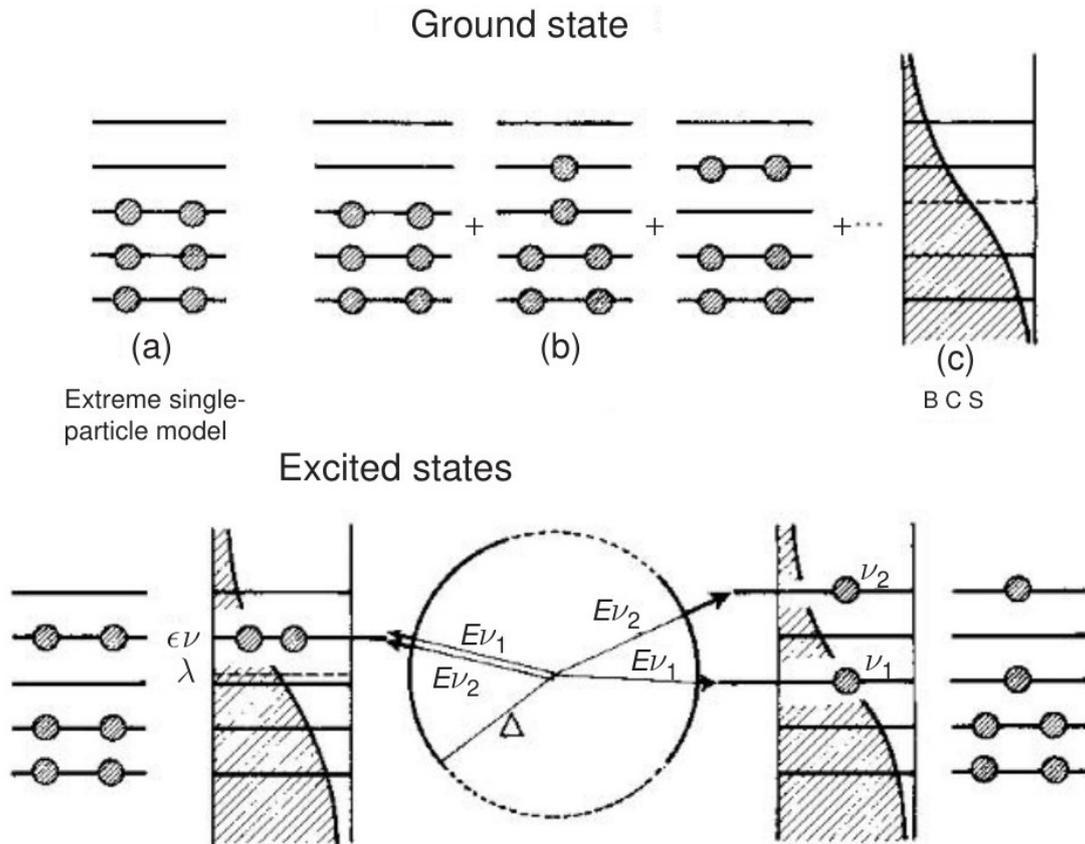


Figura 1.3: Representación esquemática del estado fundamental y los estados excitados más bajos de un sistema de fermiones con un número par de partículas en niveles de partícula simple doblemente degenerados. Fuente [7].

bajos compatibles con el principio de exclusión de Pauli, y la diferencia de energía entre el estado fundamental y los estados excitados se debe a la pérdida de energía necesaria para romper un par de partículas y levantarlas a otros niveles de energía. El estado fundamental con correlaciones de apareamiento consiste en una combinación lineal de pares de partículas en estados de inversión temporal distribuidos en todos los niveles disponibles, y los estados excitados solo se pueden generar rompiendo un par de partículas en cualquier par de niveles.

## Capítulo 2

# Modelo de Capas

El modelo de capas ha demostrado ser una herramienta muy útil para predecir y describir las propiedades nucleares, como la estructura de niveles, el espectro de energía y la distribución de la carga nuclear. El modelo de capas se basa en el concepto de campo medio nuclear (Sección 2.1) y en la utilización de potenciales fenomenológicos (Secciones 2.2 y 2.3) que describen la interacción efectiva entre los nucleones [8].

La aplicación del modelo de capas también requiere el uso de técnicas de segunda cuantización (Subsección 2.4.1) para describir los estados cuánticos de los núcleos (Subsección 2.4.2), así como el fenómeno del apareamiento puro de nucleones (Subsección 2.4.3), que es importante para la comprensión de la estabilidad nuclear y la fisión. En este capítulo, se describirá en detalle la interacción de apareamiento puro y su efecto sobre la estructura y propiedades nucleares. Al final del mismo se deduce una expresión para el Hamiltoniano nuclear de campo medio para una interacción de apareamiento puro.

## 2.1. Campo medio nuclear

Un núcleo atómico se compone de un número total de nucleones  $A = N + Z$ , de los cuales una parte se compone de protones  $Z$  y otra parte de neutrones  $N$ . Estos nucleones interactúan entre sí con una fuerza extremadamente intensa, la denominada fuerza fuerte, dando lugar a la formación de un núcleo estable. Adicionalmente a la fuerza nuclear fuerte, los protones sienten entre sí la fuerza de Coulomb. En el régimen de bajas energías, los nucleones pueden ser considerados como partículas puntuales, es decir, como partículas sin estructura interna aparente. Además, en este régimen de energía, la fuente de la interacción nuclear fuerte puede ser ignorada. Esto se debe a que la energía no alcanza a excitar los mesones y quarks constituyentes, con lo que sus propiedades son despreciables en comparación con los efectos globales de la fuerza nuclear fuerte. Esta aproximación simplificada permite una descripción más sencilla y eficiente de los procesos nucleares a bajas energías.

De manera general, la ecuación de Schrödinger para un sistema de  $A > 2$  nucleones no puede resolverse exactamente por lo que se debe buscar aproximaciones adecuadas para trabajar con estos sistemas de muchos cuerpos [9]. Una aproximación elegante es la de convertir el sistema de partículas fuertemente interactuantes en uno de *cuasipartículas* débilmente interactuantes. Luego este sistema de cuasipartículas se puede tratar perturbativamente [10]. El formalismo de cuasipartículas es tratado en el Capítulo 4. En esta sección, se introduce primeramente el *campo medio* o campo de Hartree-Fock.

Sea  $H = T + V$  el Hamiltoniano del sistema de muchas partículas a analizar:

$$H = T + V = \sum_{i=1}^A t(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}}^A v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^A \nabla_i^2 + \sum_{i < j}^A v(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) \quad (2.1)$$

donde  $m$  es la masa de un nucleón. El operador  $\nabla_i^2$  corresponde a tomar el Laplaciano respecto a las coordenadas de la partícula  $i$ -ésima, ubicada en la posición  $\mathbf{r}_i$ . Un potencial de partícula

simple desconocido puede en principio ser sumado y restado, resultando en

$$H = \left[ T + \sum_{i=1}^A v(\mathbf{r}_i) \right] + \left[ V - \sum_{i=1}^A v(\mathbf{r}_i) \right] = H_{\text{CM}} + V_{\text{RES}} \quad (2.2)$$

donde  $V_{\text{RES}}$  la *interacción residual* y

$$H_{\text{CM}} = \sum_i h(\mathbf{r}_i) = \sum_i t(\mathbf{r}_i) + \sum_i v(\mathbf{r}_i) \quad (2.3)$$

es el *Hamiltoniano de campo medio*. Se presume que la intensidad de la interacción residual es mucho menor que la del potencial original  $V$  [11].

La solución del Hamiltoniano de campo medio es directa de obtener. Se parte de la ecuación de Schrödinger de  $A$  nucleones  $H_{\text{CM}}\Psi_0 = E\Psi_0$ , la cual puede separarse usando un ansatz de la forma (sin considerar la antisimetrización)

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_A) = \prod_{i=1}^A \phi_{\alpha_i}(\mathbf{r}_i) \quad (2.4)$$

Este ansatz resulta en  $A$  ecuaciones de Schrödinger idénticas para las funciones de onda de una partícula:

$$h(\mathbf{r})\phi_{\alpha}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\alpha}\phi_{\alpha}(\mathbf{r}), \quad h(\mathbf{r}) = t(\mathbf{r}) + v(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + v(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

donde las constantes de separación  $\epsilon_{\alpha_i}$  satisfacen

$$E = \sum_{i=1}^A \epsilon_{\alpha_i} \quad (2.6)$$

Aún persiste el problema de determinar el potencial externo  $v(\mathbf{r})$ , pero esto se puede lograr a través del uso de métodos variacionales iterativos, como el método de Hartree-Fock [11].

## 2.2. Potenciales fenomenológicos

Si bien existen en la literatura métodos teóricos robustos, como el método iterativo de Hartree-Fock, existen formas más prácticas de hallar soluciones a la ecuación de Schrödinger de partícula simple [11]. Una de estas es el uso de potenciales fenomenológicos. Estos potenciales cuentan con parámetros ajustables, los cuales deben ser determinados de manera tal de obtener resultados compatibles con las mediciones experimentales disponibles.

En el presente trabajo se utilizará el denominado potencial de *Woods-Saxon* [12]:

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}} \quad (2.7)$$

Su parametrización usual es  $R = 1,27A^{1/3}$  fm,  $a = 0,67$  fm y  $V_0 = (51 - 33I)$  MeV, donde  $I \equiv (Z - N)/A$  es el exceso relativo de neutrones. Una característica a resaltar de los potenciales fenomenológicos es la simetría esférica que estos presentan. Esto es deseable ya que los núcleos que se estudiarán en este trabajo cuentan con dicha simetría. Potenciales que dependen de las variables angulares son utilizados para trabajar los denominados *núcleos deformados* [13].

## 2.3. Configuraciones de muchos nucleones

Un modelo de campo medio construido a partir solamente de un potencial Woods-Saxon sólo reproduce parcialmente el comportamiento cualitativo de los datos experimentales de energías de una partícula. Para corregir esto hay que incluir la interacción residual. El modelo de campo medio que incluye esta interacción residual se conoce como *modelo de capas* [14].

Este modelo recibe su nombre del hecho que, al someter un conjunto de fermiones a un potencial efectivo, estos presentan una estructura con energías discretizadas distribuidas de manera no uniforme, en las cuales se pueden identificar grupos de estados de energías cercanas entre sí. Estos grupos de estados próximos reciben el nombre de *capas*. La diferencia de energía entre estados

en una misma capa es mucho menor que la diferencia de energía entre capas, por esta razón configuraciones de estados que presentan capas llenas muestran una alta estabilidad. Experimentos indican que ciertos núcleos con un número especial de neutrones y protones, llamados *números mágicos*, presentan una estabilidad remarcable. Este tipo de núcleos atómicos se conocen como *núcleos mágicos* [14]. Las líneas verticales y horizontales azules en la Figura 1.1 muestran estos núcleos particulares.

Los primeros números mágicos son 2, 8, 20, 40, 50, 82 y 126 y corresponden al número de neutrones o protones cuya energía de separación es en particular más alta comparada con el número anterior, o que el primer estado excitado presente una energía por demás alta [15]. Si un núcleo posee un número mágico tanto de protones como de neutrones se dice que es un núcleo doblemente mágico. Ejemplos de estos últimos son  ${}^4\text{He}$  y  ${}^{16}\text{O}$  con  $N = Z = 2$  y 8, respectivamente.

Como se explicó al principio de esta sección, el potencial de Woods-Saxon por sí solo no es lo suficientemente preciso como para obtener el espectro del modelo de capas. Por este motivo, se debe recurrir al denominado potencial Espín-Órbita (del inglés, *spin-orbit*):

$$v_{SO}(r) = \frac{2}{\hbar^2} \frac{V_{SO}}{r} \left[ \frac{d}{dr} \frac{1}{1 + e^{(r-R)/a}} \right] = -\frac{2}{\hbar^2} \frac{V_{SO}}{ra} \frac{e^{(r-R)/a}}{[1 + e^{(r-R)/a}]^2} \quad (2.8)$$

Los parámetros  $R$  y  $a$  son los mismos que para el potencial Woods-Saxon, y  $V_{SO} \approx 0,44V_0$ . La expresión del potencial como una derivada es un indicador que este es muy relevante en la superficie del núcleo [16]. El potencial spin-orbit es diferente en términos de signo e intensidad al potencial atómico. La diferencia en el espaciado de los niveles de energía con igual momento angular orbital  $l$  que produce tiene un signo opuesto y además es de magnitud similar al espacio entre los niveles del Woods-Saxon.

## 2.4. Hamiltoniano nuclear

El Hamiltoniano nuclear es un concepto clave en la física cuántica que describe la energía total de un sistema cuántico de partículas presente en un núcleo atómico [17]. Se utiliza para describir el comportamiento de los protones y neutrones, las partículas constituyentes de los núcleos atómicos [18].

La forma usual de construir el Hamiltoniano de un núcleo atómico es mediante el uso de la segunda cuantización, un método que permite describir el comportamiento de los sistemas cuánticos con varias partículas [8]. En segunda cuantización, las partículas se describen mediante operadores cuánticos en lugar de funciones de onda. En la Subsección 2.4.1 se desarrolla este formalismo hasta obtener una expresión para el Hamiltoniano nuclear.

La interacción entre nucleones es un fenómeno fundamental en la física nuclear e incluye una variedad de procesos, como la atracción debida a la fuerza nuclear fuerte y la repulsión debido a la carga eléctrica de los protones [9]. Una forma de describir la interacción entre nucleones es mediante el modelo de interacción de apareamiento puro como el de la Subsección 2.4.3. Este modelo describe la interacción entre nucleones en términos de "parejas apareadas" de nucleones. La descripción cuántica de estados de pares de partículas se discutirá en la Subsección 2.4.2.

### 2.4.1. Segunda cuantización

El objetivo de esta sección es el de reformular al Hamiltoniano de muchos cuerpos (2.1) en la representación de *segunda cuantización* de manera que los autoestados con distintos números de partículas convivan en el mismo espacio vectorial, el *espacio de Fock*, mediante los operadores de creación y destrucción [19]. El carácter fermiónico de los nucleones se manifiesta en las reglas de anticonmutación de estos operadores. La construcción del espacio de Fock es la siguiente.

Se comienza con un conjunto de estados de partícula simple  $\{|\alpha_i\rangle\}$  del cual se construye una

base de estados de  $N$ -partículas, los determinantes de Slater:

$$\{|\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N\rangle\}_{\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N} \quad (2.9)$$

Estos estados generan el espacio de Hilbert de  $N$  fermiones idénticos. La totalidad de estos espacios de Hilbert con diferentes valores de  $N$  constituyen el espacio de Fock construido en estados de partícula simple [20].

Los vectores del espacio de Fock se especifican mediante un listado de los números de ocupación de los estados de partícula simple, es decir,

$$|\alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N\rangle = |n_1n_2n_3\cdots\rangle, \quad (2.10)$$

donde

$$n_i = \begin{cases} 1, & \text{si } i \in \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\} \\ 0, & \text{si } i \notin \{\alpha_1, \dots, \alpha_N\} \end{cases}, \quad N = \sum_{i=1}^{\infty} n_i \quad (2.11)$$

De esta manera, en vez de tener un solo conjunto de  $N$  números cuánticos de una partícula, en la representación número de ocupación se tienen  $N$  números de ocupación  $n_i = 1$ , uno por cada orbital de una partícula  $i$  ocupado.

El espacio de Fock es conveniente para trabajar con operadores que cambian el número de partículas [19]. Tales operadores se denotan por  $c_\alpha^\dagger$  y su adjunto  $c_\alpha = (c_\alpha^\dagger)^\dagger$ , definidos por

$$c_\alpha^\dagger |n_1\cdots n_\alpha\cdots\rangle = \begin{cases} \eta_\alpha |n_1\cdots n_\alpha + 1\cdots\rangle, & \text{si } n_\alpha = 0 \\ 0, & \text{si } n_\alpha = 1 \end{cases} \quad (2.12)$$

con el factor de fase  $\eta_\alpha \equiv (-1)^{\sum_{\beta < \alpha} n_\beta} = \pm 1$ . Es decir, el operador  $c_\alpha^\dagger$  crea una partícula en el estado  $|\alpha\rangle$ , mientras que el operador  $c_\alpha$  elimina una partícula del estado  $|\alpha\rangle$ . En término de los

operadores de creación y destrucción, el sistema de partículas (2.9) se escribe como

$$|\alpha_1 \cdots \alpha_N\rangle \equiv c_{\alpha_1}^\dagger c_{\alpha_2}^\dagger \cdots c_{\alpha_N}^\dagger |0\rangle = \prod_{\alpha} (c_{\alpha}^\dagger)^{n_{\alpha}} |0\rangle \quad (2.13)$$

donde  $|0\rangle \equiv |0\ 0\ 0\ \cdots\rangle$  es el estado vacío. El factor de fase  $\eta_{\alpha}$  se relaciona con el orden en el que aparecen los operadores en (2.13) [19]. En este trabajo, los estados de una partícula se ordenarán de manera ascendente de energía. Así, el orden de los estados será  $0s_{1/2}$ ,  $0p_{3/2}$ ,  $0p_{1/2}$ ,  $0d_{5/2}$ ,  $1s_{1/2}$ ,  $0d_{3/2}$ ,  $\dots$ . Los subestados correspondientes a un estado degenerado se ordenan de forma ascendente en el número cuántico  $m$  [19].

Debido a que los operadores de creación y destrucción manipulan fermiones, estos satisfacen las relaciones de anticonmutación [8]

$$\{c_{\alpha}, c_{\beta}^\dagger\} \equiv c_{\alpha} c_{\beta}^\dagger + c_{\beta}^\dagger c_{\alpha} = \delta_{\alpha\beta}, \quad \{c_{\alpha}, c_{\beta}\} = \{c_{\alpha}^\dagger, c_{\beta}^\dagger\} = 0, \quad \text{para todos } \alpha, \beta \quad (2.14)$$

Es útil definir el tensor asociado al operador de destrucción  $\tilde{c}_{\alpha}$  y su hermítico conjugado  $\tilde{c}_{\alpha}^\dagger = (\tilde{c}_{\alpha})^\dagger$  mediante [21]

$$\tilde{c}_{\alpha} = (-1)^{j_a + m_{\alpha}} c_{-\alpha}, \quad c_{-\alpha} = c_{a, -m_{\alpha}}, \quad \alpha \equiv \{a, m_{\alpha}\} = \{n_a, l_a, j_a, m_{\alpha}\} \quad (2.15)$$

Naturalmente, la representación de segunda cuantización se puede extender para representar operadores. Los operadores de un cuerpo son el tipo de operadores  $T = \sum_i t(i)$  que actúan tanto en las coordenadas espaciales como en el espín, de a una partícula a la vez. Si se aplica sobre la partícula  $i$ -ésima, el operador es  $t(i)$ . En representación coordenada este resulta  $t(\mathbf{x}_i)$ , donde  $\mathbf{x}_i = (\mathbf{r}_i, \chi_i)$  incluye ambas coordenadas espaciales y espín. El efecto total de un operador  $T$  actuando sobre un núcleo se obtiene sumando la contribución de haber aplicado el operador en cada nucleón, es decir,  $T = \sum_{i=1} t(\mathbf{x}_i)$ . Un ejemplo es la energía cinética. De manera general un operador de un cuerpo posee la forma [8]:

$$T = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^\dagger c_{\beta}, \quad t_{\alpha\beta} \equiv \langle \alpha | T | \beta \rangle = \int d^3 \mathbf{r} \phi_{\alpha}^\dagger(\mathbf{x}) t(\mathbf{x}) \phi_{\beta}(\mathbf{x}). \quad (2.16)$$

Por otro lado, un operador de dos cuerpos, como por ejemplo la energía potencial de interacción, actúa simultáneamente sobre dos partículas. Por tanto, se deben sumar todas las interacciones de a pares de este operador  $v(i,j)$  para calcular la acción total  $V = \sum_{i<j} v(i,j)$ . En representación coordenada, esta expresión resulta  $V = \sum_{i<j} v(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)$  que en segunda cuantización lee [8]

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} v_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (2.17)$$

donde  $v_{\alpha\beta\gamma\delta} = \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle = \int d^3\mathbf{r}_1 \int d^3\mathbf{r}_2 \phi_{\alpha}^{\dagger}(\mathbf{x}_1) \phi_{\beta}^{\dagger}(\mathbf{x}_2) v(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \phi_{\gamma}(\mathbf{x}_1) \phi_{\delta}(\mathbf{x}_2)$ .

Es conveniente escribir la interacción entre dos nucleones mediante los elementos matriciales antisimetrizados

$$\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \equiv v_{\alpha\beta\gamma\delta} - v_{\alpha\beta\delta\gamma} \quad (2.18)$$

debido a que poseen propiedades de simetría [8]

$$\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} = -\bar{v}_{\beta\alpha\gamma\delta} = -\bar{v}_{\alpha\beta\delta\gamma} = \bar{v}_{\beta\alpha\delta\gamma} = \bar{v}_{\gamma\delta\alpha\beta}^* \quad (2.19)$$

En término de los elementos antisimetrizados  $\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}$ , el potencial (2.17) resulta

$$V = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (2.20)$$

Finalmente, el Hamiltoniano de un sistema de partículas sometidas a una interacción de a pares resulta

$$H = T + V = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (2.21)$$

#### 2.4.2. Núcleos de dos partículas

Sistemas de dos partículas pueden describirse en la representación número de ocupación de manera directa a partir de crear dos partículas sobre un carozo o *core* apropiadamente elegido

para minimizar el coste computacional de los cálculos. La elección del *core* permite definir el espacio de valencia: el conjunto de estados de partícula simple disponibles para la descripción de la dinámica de un dado sistema [8].

Para la descripción de estados cuánticos de dos partículas interactuando resulta indispensable considerar el apareamiento entre los momentos angulares involucrados. El estado de dos partículas idénticas puede escribirse mediante la siguiente función de onda [8]

$$|a b; J M\rangle = \mathcal{N}_{ab}^J \sum_{m_\alpha m_\beta} (j_a m_\alpha j_b m_\beta | J M) c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger |\text{CORE}\rangle, \quad \mathcal{N}_{ab}^J \equiv \frac{\sqrt{1 + (-1)^J \delta_{\alpha\beta}}}{1 + \delta_{\alpha\beta}} \quad (2.22)$$

introduciendo el acople de operadores de creación mediante los coeficientes de Clebsch–Gordan,

$$\left[ c_a^\dagger c_b^\dagger \right]_{JM} \equiv \sum_{m_\alpha m_\beta} (j_a m_\alpha j_b m_\beta | J M) c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger, \quad (2.23)$$

la función de onda toma la forma

$$|a b; J M\rangle = \mathcal{N}_{ab}^J \left[ c_a^\dagger c_b^\dagger \right]_{JM} |\text{CORE}\rangle \quad (2.24)$$

Para el caso  $a = b$ , es decir dos nucleones idénticos en el mismo orbital, se tiene  $\mathcal{N}_{aa}^J = 0$  si  $J$  es impar, por lo que solo ocurren estados cuando  $J$  es par. De otra manera se tiene  $\mathcal{N}_{ab}^J = 1$ , cuando  $a \neq b$ , y  $\mathcal{N}_{aa}^J = 1/\sqrt{2}$ , cuando  $J$  es par.

Sustituyendo (2.24) en (2.20) devuelve

$$V = \frac{1}{4} \sum_{\substack{\alpha\beta\gamma\delta \\ JM J' M'}} \frac{(j_a m_\alpha j_b m_\beta | J M)(j_c m_\gamma j_d m_\delta | J' M')}{\mathcal{N}_{ab}^J \mathcal{N}_{cd}^{J'}} \langle a b; J M | V | c d; J' M' \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma \quad (2.25)$$

Acoplando los operadores de creación y destrucción (2.15) resulta

$$V = -\frac{1}{4} \sum_{abcd} \sum_{JM J' M'} \frac{\langle a b; J M | V | c d; J' M' \rangle}{\mathcal{N}_{ab}^J \mathcal{N}_{cd}^{J'}} \left[ c_a^\dagger c_b^\dagger \right]_{JM} (-1)^{J'-M'} \left[ \tilde{c}_c \tilde{c}_d \right]_{J', -M'} \quad (2.26)$$

La interacción entre dos partículas  $V$  es un escalar, es decir un tensor esférico de rango  $\lambda = 0$ . Aplicando el teorema de Wigner-Eckart permite ver que los elementos matriciales del potencial son diagonales en  $J$  e independientes de  $M$  [22]. Luego, los elementos de  $V$  resultan

$$\langle a b; J M | V | c d; J' M' \rangle \equiv \delta_{JJ'} \delta_{MM'} \langle a b; J | V | c d; J \rangle \quad (2.27)$$

Mediante un directo manejo algebraico se llega a la siguiente expresión para el potencial (2.26)

$$V = -\frac{1}{4} \sum_{abcd} \sum_J \frac{J \langle a b; J | V | c d; J \rangle}{\mathcal{N}_{ab}^J \mathcal{N}_{cd}^{J'}} \left[ [c_a^\dagger c_b^\dagger]_J [\tilde{c}_c \tilde{c}_d]_{J'} \right]_{00} \quad (2.28)$$

que muestra explícitamente el caracter escalar de  $V$ .

### 2.4.3. Interacción de apareamiento puro

Considerese la interacción delta de superficie (SDI, por sus siglas en inglés)

$$V_{\text{SDI}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = -V_0 \delta(r_1 - R) \delta(r_2 - R) \delta(\Omega_1 - \Omega_2) \quad (2.29)$$

Las dimensiones de  $V_0$  son energía  $\times$  área,  $R$  es el radio del núcleo atómico y  $\mathbf{r}_i = (r_i, \Omega_i)$  son las coordenadas de los nucleones. La interacción entonces sólo ocurre cuando ambos nucleones se encuentran en el mismo punto en la superficie nuclear. Se observa en la realidad que la SDI es capaz de reproducir cualitativamente el comportamiento de los datos de dispersión nucleón-nucleón de manera sorprendente [8].

La Tabla 2.1 muestra el valor medio de un potencial SDI para parejas nucleón-nucleón con distintos momentos angulares totales  $J$ . Se puede observar que la interacción para el par  $J = 0$  es mucho más intensa que para las parejas con  $J \neq 0$  [8]. Esto motiva simplificar la interacción total dentro de una capa  $j$  considerando solamente las contribuciones *time reverse* uno del otro.

$J$	0	2	4	6
$\langle V_{\text{SDI}} \rangle$	-4.000	-0.952	-0.468	-0.233

Tabla 2.1: Valores medios de un potencial SDI arbitrario [8].

Retomando el sistema de  $A$  nucleones interactuantes mediante un potencial de a pares (2.28)

$$H = \sum_{\alpha\beta} t_{\alpha\beta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_J \frac{\langle a b; J | V | c d; J \rangle}{\mathcal{N}_{ab}^J \mathcal{N}_{cd}^J} \sum_M (-1)^{J-M} \left[ c_a^{\dagger} c_b^{\dagger} \right]_{JM} \left[ \tilde{c}_d \tilde{c}_c \right]_{J-M} \quad (2.30)$$

Se procede a imponer una interacción de apareamiento puro, es decir,

$$\langle a b; J | V | c d; J \rangle = -\frac{G}{2} \delta_{J0} \delta_{ab} \delta_{cd} \hat{j}_a \hat{j}_c, \quad \hat{j} \equiv \sqrt{2j+1}, \quad G > 0 \quad (2.31)$$

Se comienza a partir de una identidad de los símbolos de Clebsch-Gordan:  $\langle j m j - m | 00 \rangle \hat{j} = (-1)^{j-m}$ . Luego el siguiente acople de los operadores de creación y destrucción resulta:

$$\left[ c_a^{\dagger} c_a^{\dagger} \right]_{00} = \sum_{m_{\alpha} > 0} (j_a m_{\alpha} j_a m_{\alpha} | 00) c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha}^{\dagger} = \frac{2}{\hat{j}_a} \sum_{m_{\alpha} > 0} (-1)^{j_a + m_{\alpha}} c_{a m_{\alpha}}^{\dagger} c_{a - m_{\alpha}}^{\dagger} = \frac{2}{\hat{j}_a} \sum_{m_{\alpha} > 0} c_{\alpha}^{\dagger} \tilde{c}_{\alpha}^{\dagger} = \frac{2}{\hat{j}_a} P_a^{\dagger}$$

donde se introdujo el operador creación de pares  $P_a^{\dagger} \equiv \sum_{m_{\alpha} > 0} c_{\alpha}^{\dagger} \tilde{c}_{\alpha}^{\dagger}$  el cual crea un par de partículas en el estado  $\alpha$  con proyecciones del momento angular total opuestas. Así la energía potencial en (2.30) resulta

$$\begin{aligned} V &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \sum_J \frac{\delta_{J0} \delta_{ab} \delta_{cd} (-G/2) \hat{j}_a \hat{j}_c}{4 \mathcal{N}_{ab}^J \mathcal{N}_{cd}^J} \sum_M (-1)^{J-M} \left[ c_a^{\dagger} c_b^{\dagger} \right]_{JM} \left[ \tilde{c}_d \tilde{c}_c \right]_{J-M} \\ &= \sum_{\alpha\gamma} -\frac{G \hat{j}_a \hat{j}_c}{8 \mathcal{N}_{aa}^0 \mathcal{N}_{cc}^0} \left[ c_a^{\dagger} c_a^{\dagger} \right]_{00} \left[ \tilde{c}_c \tilde{c}_c \right]_{00} = \sum_{ac} -\frac{G}{4} \hat{j}_a \hat{j}_c \left( \frac{2}{\hat{j}_a} P_a^{\dagger} \right) \left( \frac{2}{\hat{j}_c} P_c \right) = -G \sum_{ac} P_a^{\dagger} P_c \end{aligned} \quad (2.32)$$

Los índices  $\alpha, \beta, \gamma$  en (2.30) representan una base generada por el campo medio. Por ello, los coeficientes  $t_{\alpha\beta}$  son las autoenergías  $\varepsilon_{\alpha}$  del campo medio, con lo que el Hamiltoniano resulta

$$H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} - G \sum_{ac} P_a^{\dagger} P_c, \quad G > 0. \quad (2.33)$$

## Capítulo 3

# Teoría BCS

Hasta ahora se ha tratado con núcleos atómicos de capa abierta dentro de esquemas simplificados usando el Hamiltoniano de apareamiento puro. Este Hamiltoniano es demasiado simple para una descripción realista de los espectros de excitación, pero tiene la ventaja de proporcionar soluciones exactas dentro de enfoques simplificados [8].

En este capítulo, el concepto de cuasipartícula se convierte en una herramienta activa de trabajo. En la Sección 3.2 BCS se introducen las *cuasipartículas*, a través de la transformación que conduce a ellas. Estas cuasipartículas están compuestas de componentes de partícula y agujero con ciertas amplitudes de ocupación [23]. La teoría BCS es una teoría avanzada de muchos cuerpos, pero se puede usar con la fuerza de apareamiento simple. Sin embargo, el marco permite una generalización a cualquier interacción de dos cuerpos. Se abordará el significado del campo medio de cuasipartículas y las energías de cuasipartícula individual. Se discutirán las soluciones BCS para la interacción de apareamiento puro presentada en la Subsección 2.4.3.

La teoría BCS fue introducida por primera vez por John Bardeen, Leon Cooper y John Robert Schrieffer en 1957 para la descripción microscópica de la superconductividad de los metales. En los metales superconductores, la atracción efectiva a larga distancia entre dos electrones se mediatiza por vibraciones cuantizadas de la red, fonones de la red. Los electrones correlacionados forman

parejas con spin total cero. Estas parejas bosónicas efectivas se condensan en el estado base, con una energía de gap resultante a los estados excitados. A bajas temperaturas, los electrones que se dispersan de la red no pueden superar este gap de energía. Se mantienen en el estado base y atraviesan la masa del metal sin perder energía en colisiones con la red. Por lo tanto, una corriente eléctrica puede fluir sin resistencia.

Hay evidencia experimental de la presencia de un condensado colectivo similar en los núcleos atómicos. Los nucleones de valencia de un núcleo sienten una fuerza atractiva fuerte que proviene del componente a corto alcance de la interacción nucleón-nucleón. Esta atracción a corto alcance fue imitada por la fuerza de apareamiento pura en el Capítulo 2.4. Al reconocer el fenómeno de apareamiento en los núcleos en 1958 se propuso aplicar la teoría BCS a los núcleos atómicos [24].

### 3.1. Estado fundamental

La teoría BCS puede ser vista como un problema variacional con un ansatz adecuado de la función de onda. Así, la mejor función de onda se encuentra optimizando los parámetros para obtener la menor energía. De esta manera, el ansatz del estado fundamental en la teoría BCS se escribe como

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\alpha>0} (u_\alpha - v_\alpha A_\alpha^\dagger) |\text{CORE}\rangle \quad (3.1)$$

donde  $u_\alpha$  y  $v_\alpha$  son los parámetros variacionales y el operador  $A_\alpha^\dagger = c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger$  crea una pareja de nucleones iguales. La forma de los parámetros variacionales en (3.1) se eligieron para núcleos esféricos, puesto que estos no dependen de la proyección del momento angular  $m_\alpha$  [21].

A pesar de que el estado BCS no tiene un buen número de partículas, se puede descomponer como una suma de autoestados  $|N\rangle$ . Partiendo de la expansión serie de potencias a segundo orden del operador exponencial:

$$\exp\left(-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} A_\alpha^\dagger\right) = \exp\left(-\frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger\right) = 1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger + 0 = 1 - \frac{v_\alpha}{u_\alpha} c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger \quad (3.2)$$

se puede reescribir el estado fundamental como

$$\begin{aligned}
|\text{BCS}\rangle &= \prod_{\alpha>0} u_a \left(1 - \frac{v_a}{u_a} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle = \prod_{\alpha>0} u_a \exp\left(-\frac{v_a}{u_a} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle \\
&= \prod_{\beta>0} u_b \prod_{\alpha>0} \exp\left(-\frac{v_a}{u_a} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle = \prod_{\beta>0} u_b \exp\left(-\sum_{\alpha>0} \frac{v_a}{u_a} A_\alpha^\dagger\right) |\text{CORE}\rangle \quad (3.3) \\
&= \prod_{\beta>0} u_b \sum_n \frac{1}{n!} \left(-\sum_{\alpha>0} \frac{v_a}{u_a} A_\alpha^\dagger\right)^n |\text{CORE}\rangle
\end{aligned}$$

Este resultado a su vez se puede reescribir resaltando la dependencia en el número de partículas:

$$|\text{BCS}\rangle = \prod_{\beta>0} u_b \sum_{N \text{ par}} \frac{1}{(N/2)!} |\text{N}\rangle, \quad |\text{N}\rangle = \left(-\sum_{\alpha>0} \frac{v_a}{u_a} A_\alpha^\dagger\right)^{N/2} |\text{CORE}\rangle \quad (3.4)$$

$|\text{N}\rangle$  es un autoestado sin normalizar del operador número de partículas  $N$ .

Como se requiere que el estado fundamental esté normalizado se llega a la condición  $|u_a|^2 + |v_a|^2 = 1$  para todo  $a$ . Eligiendo fases para las amplitudes  $u_a$  y  $v_a$  de manera que estas sean reales, esta última condición resulta

$$u_a^2 + v_a^2 = 1 \quad \text{para todo } a \quad (3.5)$$

## 3.2. Formalismo de cuasipartículas

El estado fundamental es mucho más cómodo para trabajar que los estados con buen número de partículas  $|\text{N}\rangle$ . Esto es así puesto que  $|\text{BCS}\rangle$  es el vacío para las cuasipartículas. Se define  $a_\alpha^\dagger$  al operador que crea una cuasipartícula en el orbital  $\alpha$ . El correspondiente operador de aniquilación es  $a_\alpha$ , y  $\tilde{a}_\alpha = (-1)^{j_\alpha + m_\alpha} a_{-\alpha}$  es el tensor asociado. Estos operadores son una combinación lineal de los usuales operadores de partículas [8]

$$a_\alpha^\dagger = u_a c_\alpha^\dagger + v_a \tilde{c}_\alpha, \quad \tilde{a}_\alpha = u_a \tilde{c}_\alpha - v_a c_\alpha^\dagger \quad (3.6)$$

Invertir estas relaciones usando la condición de normalización (3.5) resulta en

$$c_\alpha^\dagger = u_a a_\alpha^\dagger - v_a \tilde{a}_\alpha \quad , \quad \tilde{c}_\alpha = u_a \tilde{a}_\alpha + v_a a_\alpha^\dagger \quad (3.7)$$

Las relaciones adjuntas de las ecuaciones previas son respectivamente

$$a_\alpha = u_a c_\alpha + v_a \tilde{c}_\alpha^\dagger \quad , \quad \tilde{a}_\alpha^\dagger = u_a \tilde{c}_\alpha^\dagger - v_a c_\alpha \quad (3.8)$$

$$c_\alpha = u_a a_\alpha - v_a \tilde{a}_\alpha^\dagger \quad , \quad \tilde{c}_\alpha^\dagger = u_a \tilde{a}_\alpha^\dagger + v_a a_\alpha \quad (3.9)$$

De las relaciones de anticonmutación (2.14) y las relaciones (3.5)-(3.9), se tiene

$$\{a_\alpha^\dagger, a_\beta^\dagger\} = \{a_\alpha, a_\beta\} = 0 \quad , \quad \{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha\beta} \quad (3.10)$$

que no son más que las relaciones de anticonmutación de la estadística fermiónica. De esta manera, las cuasipartículas resultan ser fermiones, como los nucleones que las constituyen.

Operar con  $a_\alpha$  o  $\tilde{a}_\alpha$  sobre el estado fundamental devuelve

$$\tilde{a}_\alpha |\text{BCS}\rangle = a_\alpha |\text{BCS}\rangle = 0 \quad (3.11)$$

por lo que  $|\text{BCS}\rangle$  puede llamarse apropiadamente como el vacío BCS. En el caso típico de la BCS, cada operador  $a_\alpha^\dagger$  genera una cuasipartícula que consiste en partícula con una amplitud de probabilidad  $v_a$  y agujero con una amplitud de probabilidad  $u_a$ . Se entiende entonces que el orbital  $\alpha$  de una sola partícula está vacío con probabilidad  $u_a^2$  y ocupado con probabilidad  $v_a^2$ , cumpliendo con la normalización apropiada (3.5). En total, un orbital  $j$  está habitado por  $(2j + 1)v_j^2$  partículas y  $(2j + 1)u_j^2$  agujeros [1].

### 3.3. Ecuaciones BCS

Para las cuasipartículas BCS, el ordenamiento normal y las contracciones de los operadores se realizan, por definición, con respecto al estado base  $|\text{BCS}\rangle$ . Las contracciones de los operadores de creación y aniquilación de cuasipartículas se pueden escribir inmediatamente como

$$\overline{a_\alpha a_\beta^\dagger} = \langle \text{BCS} | a_\alpha a_\beta^\dagger | \text{BCS} \rangle = \delta_{\alpha\beta}, \quad \text{el resto } 0 \quad (3.12)$$

Con estas contracciones y las transformaciones (3.7) y (3.9) se pueden encontrar las contracciones de los operadores  $c_\alpha$  y  $c_\alpha^\dagger$  con respecto al vacío  $|\text{BCS}\rangle$ :

$$\overline{c_\alpha c_\beta^\dagger} = u_a^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad \overline{c_\alpha^\dagger c_\beta} = v_a^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad \overline{c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger} = u_a v_a (-1)^{j_a - m_\alpha} \delta_{\alpha, -\beta}, \quad \overline{c_\alpha c_\beta} = u_a v_a (-1)^{j_a + m_\alpha} \delta_{\alpha, -\beta}$$

Estas contracciones son cruciales para la derivación del Hamiltoniano nuclear en la representación de cuasipartículas. El Apéndice A contiene la derivación del Hamiltoniano nuclear en el formalismo de las cuasipartículas. Esta derivación es extensa y fue omitida en esta sección. El resultado importante es la expresión final para el Hamiltoniano nuclear

$$H = H_0 + \sum_b H_{11}(b) [a_b^\dagger \tilde{a}_b]_{00} + \sum_b H_{20}(b) \left( [a_b^\dagger a_b^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_b \tilde{a}_b]_{00} \right) + V_{\text{RES}} \quad (3.13)$$

El último término es la interacción residual

$$V_{\text{RES}} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{N} \left[ c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma \right]_{\text{BCS}} \quad (3.14)$$

y los coeficientes  $H_0$ ,  $H_{11}(b)$  y  $H_{20}(b)$  son

$$H_0 = \sum_a \varepsilon_a \hat{j}_a^2 v_a^2 - \frac{1}{4} G \sum_a v_a^4 \hat{j}_a^2 - \frac{1}{4} G \sum_{ac} u_a v_a u_c v_c \hat{j}_a^2 \hat{j}_c^2 \quad (3.15)$$

$$H_{11}(b) = (u_b^2 - v_b^2) \hat{j}_b (\varepsilon_b - G v_b^2) + u_b v_b G \hat{j}_b \sum_a u_a v_a \hat{j}_a^2 \quad (3.16)$$

$$H_{20}(b) = u_b v_b (\varepsilon_b - G v_b^2) \hat{j}_b - \frac{1}{4} (u_b^2 - v_b^2) G \hat{j}_b \sum_a u_a v_a \hat{j}_a^2 \quad (3.17)$$

con  $\hat{j} = \sqrt{2j+1}$  y  $G > 0$ . Las ecuaciones (3.13)-(3.17) constituyen la representación del Hamiltoniano nuclear en cuasipartículas, para una interacción de apareamiento puro.

### 3.3.1. BCS como un problema variacional

La manera más sencilla de reducir las incertezas que surgen de la no conservación del número de partículas en la BCS es restringir el problema variacional para obtener un buen promedio de partículas  $\bar{n}$  [25]. La restricción en términos del número de partículas es  $\langle \text{BCS} | N | \text{BCS} \rangle = \bar{n}$ .

El operador  $N = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha$  se puede escribir como (ver Apéndice A)

$$N = \sum_a \hat{j}_a^2 v_a^2 + \sum_a \hat{j}_a (u_a^2 - v_a^2) [a_a^\dagger \tilde{a}_a]_{00} + \sum_a \hat{j}_a u_a v_a \left( [a_a^\dagger a_a^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_a \tilde{a}_a]_{00} \right) \quad (3.18)$$

donde sólo el término constante contribuye a  $\bar{n}$ , con lo que  $\bar{n} = \sum_a \hat{j}_a^2 v_a^2$ . Imponer esta restricción en el promedio de partículas lleva a un problema variacional restringido. Este problema puede solucionarse con el método de multiplicadores de Lagrange [26]. Para ello, se procede definiendo un Hamiltoniano auxiliar  $\mathcal{H} \equiv H - \lambda N$  con el que el problema variacional es

$$\delta \langle \text{BCS} | \mathcal{H} | \text{BCS} \rangle = 0 \quad (3.19)$$

De (3.13) y (3.18) se ve que

$$\langle \text{BCS} | \mathcal{H} | \text{BCS} \rangle = H_0 - \lambda \sum_a \hat{j}_a^2 v_a^2 \equiv \mathcal{H}_0 \quad (3.20)$$

Junto a (3.15)  $\mathcal{H}_0$  resulta

$$\mathcal{H}_0 = \sum_a (\varepsilon_a - \lambda) \hat{j}_a^2 v_a^2 - \frac{1}{4} G \sum_a v_a^4 \hat{j}_a^2 - \frac{1}{4} G \sum_{ac} u_a v_a u_c v_c \hat{j}_a^2 \hat{j}_c^2 \quad (3.21)$$

Es decir, el cambio de  $H_0$  a  $\mathcal{H}_0$  es equivalente a reemplazar las energías  $\varepsilon_a$  en  $H_0$  por  $\varepsilon_a - \lambda$ . Esto mismo ocurre para (3.16) y (3.17):

$$\mathcal{H}_{11}(b)|_\varepsilon = H_{11}(b)|_{\varepsilon-\lambda} \quad , \quad \mathcal{H}_{20}(b)|_\varepsilon = H_{20}(b)|_{\varepsilon-\lambda} \quad (3.22)$$

Las ecuaciones (3.23)-(3.25) contienen la notación con la que se procede a reescribir el Hamiltoniano para el tratamiento variacional y subsecuente interpretación física:

$$\Delta \equiv \frac{1}{2}G \sum_a u_a v_a \hat{j}_a^2, \quad (3.23)$$

$$\mu_b \equiv v_b^2 G, \quad (3.24)$$

$$e_b \equiv \varepsilon_b - \lambda - \mu_b. \quad (3.25)$$

con lo que se llega a las siguiente expresiones concisas:

$$\mathcal{H}_0 = \sum_b \frac{1}{2} [v_b^2 (2e_b + \mu_b) - u_b v_b \Delta] \hat{j}_b^2 \quad (3.26)$$

$$\mathcal{H}_{11}(b) = \hat{j}_b [(u_b^2 - v_b^2) e_b + 2u_b v_b \Delta] \quad (3.27)$$

$$\mathcal{H}_{20}(b) = \frac{1}{2} [2u_b v_b e_b - \Delta (u_b^2 - v_b^2)] \hat{j}_b \quad (3.28)$$

### 3.3.2. Derivación de las ecuaciones BCS

En esta parte se procede a realizar el cálculo variacional que lleva a las ecuaciones BCS. Para esto, basta con requerir

$$\frac{\partial}{\partial v_c} \mathcal{H}_0 = 0 \quad \text{para todo } c \quad (3.29)$$

puesto que (3.5) hace  $u_c$  dependiente de  $v_c$ . De esta condición resulta  $\partial u_b / \partial v_c = -\delta_{bc} v_c / u_c$ .

En preparación para la derivación de las ecuaciones BCS es importante notar las relaciones

$$\frac{\partial}{\partial v_c} \left( e_b + \frac{1}{2} \mu_b \right) = -\frac{1}{2} \frac{\partial \mu_b}{\partial v_c}, \quad \frac{\partial \mu_b}{\partial v_c} = -2v_c \delta_{bc} G, \quad \frac{\partial \Delta}{\partial v_c} = \left( \frac{u_c^2 - v_c^2}{2u_c} \right) G \hat{j}_c^2 \quad (3.30)$$

que junto a (3.26)-(3.28) permiten reescribir (3.29) de la siguiente forma

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{\partial \mathcal{H}_0}{\partial v_c} \\
&= \sum_b \hat{j}_b^2 \left[ -\frac{v_b^2}{2} \frac{\partial \mu_b}{\partial v_c} + 2v_b \delta_{bc} \left( e_b + \frac{\mu_b}{2} \right) - \frac{u_b v_b}{2} \frac{\partial \Delta}{\partial v_c} + \frac{\delta_{bc} \Delta}{2} \left( \frac{v_c v_b}{u_c} - u_b \right) \right] \\
&= \sum_b \hat{j}_b^2 \left[ v_b^2 (v_c \delta_{bc} G) - \frac{u_b v_b}{2} \left( \frac{u_c^2 - v_c^2}{2u_c} \right) G \hat{j}_c^2 \right] + v_c (2e_c - v_c^2 G) \hat{j}_c^2 + \left( \frac{v_c^2 - u_c^2}{2u_c} \right) \Delta \hat{j}_c^2 \quad (3.31) \\
&= v_c^3 G \hat{j}_c^2 + \left( \frac{v_c^2 - u_c^2}{2u_c} \right) \Delta \hat{j}_c^2 + v_c (2e_c - v_c^2 G) \hat{j}_c^2 + \left( \frac{v_c^2 - u_c^2}{2u_c} \right) \Delta \hat{j}_c^2 \\
&= 2v_c e_c \hat{j}_c^2 + \left( \frac{v_c^2 - u_c^2}{u_c} \right) \Delta \hat{j}_c^2
\end{aligned}$$

Esto brinda  $2u_c v_c e_c = \Delta(u_c^2 - v_c^2)$ . Elevando al cuadrado esta ecuación y usando (3.5) se ve que

$$4(e_c^2 + \Delta^2)u_c^2 v_c^2 = \Delta^2 \quad (3.32)$$

de donde se obtienen las amplitudes de ocupación:

$$u_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{e_c}{E_c}}, \quad v_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{e_c}{E_c}} \quad (3.33)$$

donde

$$E_c \equiv \sqrt{e_c^2 + \Delta^2} \quad (3.34)$$

es la cuasienergía como quedará claro en breve.

En el estado fundamental de la BCS el par de nucleones ocupa estados inverso-temporales como se ve en la estructura del operador  $A_\alpha^\dagger = c_\alpha^\dagger \tilde{c}_\alpha^\dagger$ . Esto se interpreta como que un nucleón ocupa el orbital  $\alpha$  y otro el  $-\alpha$  [27].

La cantidad  $\Delta$  definida en (3.23) se llama gap de apareamiento o gap de energía por razones que serán evidentes más adelante. A partir de la raíz cuadrada positiva de (3.32):

$$u_c v_c = \frac{\Delta}{2E_c} \quad (3.35)$$

se puede despejar  $\Delta$  y sustituyendo en (3.32) se obtiene la denominada ecuación del gap:

$$\Delta = \frac{G}{2} \sum_a u_a v_a \hat{j}_a^2 = \frac{G}{2} \sum_a (2j_a + 1) u_a v_a \quad (3.36)$$

la cual para los casos donde  $\Delta \neq 0$  se simplifica a

$$\frac{4}{G} = \sum_a \frac{(2j_a + 1)}{E_a} \quad (3.37)$$

Las condiciones para un valor mínimo de  $\mathcal{H}_0$  surgen de las ecuaciones anteriores. Aplicando dichas ecuaciones a (3.26)-(3.28), se encuentra que

$$\mathcal{H}_0 = \frac{1}{4} \sum_b \frac{\hat{j}_b^2}{E_b} [(E_b - e_b)(2e_b + \mu_b) - \Delta^2], \quad \mathcal{H}_{11}(b) = \hat{j}_b E_b, \quad \mathcal{H}_{20}(b) = 0 \quad (3.38)$$

El Hamiltoniano auxiliar se convierte entonces en

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_b \hat{j}_b E_b [a_b^\dagger \tilde{a}_b]_{00} + V_{\text{RES}} \quad (3.39)$$

Reescribiendo el segundo término en forma desacoplada como  $\sum_\beta E_b a_\beta^\dagger a_\beta$  hace clara la interpretación de  $E_b$  como la cuasienergía. De acuerdo a la definición de  $\mathcal{H}_0$  el término constante  $H_0$  original es

$$H_0 = \mathcal{H}_0 + \lambda \sum_b \hat{j}_b^2 v_b^2 = \mathcal{H}_0 + \lambda \bar{n} \quad (3.40)$$

Sustituyendo (3.33) y entonces usando (3.25) se obtiene

$$H_0 = \sum_b \hat{j}_b^2 v_b^2 \left( \varepsilon_b - \frac{1}{2} G v_b^2 \right) - \frac{\Delta^2}{G}. \quad (3.41)$$

Ecuaciones (3.33), (3.34), (3.36) y la expresión para el número promedio de partículas cons-

tituyen las denominadas ecuaciones BCS [1]

$$\boxed{v_c = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{e_c}{E_c}}, \quad E_c = \sqrt{e_c^2 + \Delta^2}, \quad \Delta = \frac{G}{2} \sum_a (2j_a + 1) u_a v_a, \quad \bar{n} = \sum_a \hat{j}_a^2 v_a^2} \quad (3.42)$$

Los primeros dos términos del Hamiltoniano (3.39) contienen gran parte de la interacción residual original. Estos describen cuasipartículas no interactuantes con energía  $E_b$ . Esto motiva a llamar a esta aproximación *campo medio de cuasipartículas*, en analogía con el campo medio de Hartree-Fock.

### 3.3.3. Interpretación física de parámetros básicos

En esta sección está dirigida a brindar las interpretaciones física de tres parámetros claves de la teoría BCS, a ser, el gap de apareamiento, la autoenergía y el potencial químico.

#### Gap de apareamiento

Los estados excitados de un núcleo con número par de protones y neutrones surgen de desprender una o más parejas de nucleones del estado fundamental |BCS>. La menor energía requerida es la necesaria para extraer una pareja. Luego una energía extra igual a la energía de ligadura de la pareja debe ser entregada desde el exterior. La pareja rota se interpreta como dos cuasipartículas o simplemente como una excitación de dos cuasipartículas. La energía necesaria para romper una pareja es la energía de excitación de la configuración de dos cuasipartículas.

El hecho que las cuasienergías satisfagan  $E_a = \sqrt{e_a^2 + \Delta^2} \geq \Delta$  implica que para las energías de excitación de dos cuasipartículas se cumple  $E_{2qp} \geq 2\Delta$ . En la terminología introducida en la Sección 2.4.2, las cantidades  $\Delta$  son gaps de apareamiento mientras que las cantidades  $2\Delta$  son las energías de apareamiento (ver Sección 1.3).

Considerese el Hamiltoniano de una única capa  $j$  que cuenta con sólo dos partículas interac-

tuando mediando una fuerza de apareamiento puro. Los elementos matriciales del Hamiltoniano son  $\langle 0|A_{jm}V_{\text{PURO}}A_{jm'}^\dagger|0\rangle = -G$ , con  $G > 0$  la intensidad de la interacción. Diagonalizando el Hamiltoniano se ve que el polinomio característico es  $(-G\Omega - E)(-E)^{\Omega-1} = 0$ , donde  $\Omega = \frac{1}{2}(2j + 1)$  es la degeneración de la pareja [8]. Este polinomio da los autovalores

$$E_1 = -\Omega G, \quad E_i = 0 \text{ para } i = 2, 3, \dots, \Omega \quad (3.43)$$

Por lo tanto, se puede identificar la energía de cuasipartícula con la mitad de la energía de apareamiento

$$E = \frac{1}{2}\Omega G = \frac{1}{4}(2j + 1)G. \quad (3.44)$$

### Autoenergía

La cantidad  $\mu_a$ , definida en (3.24), es la denominada autoenergía. Esta describe una renormalización de una energía de partícula simple  $\varepsilon_a$  debido al hecho que la energía de un nucleón en el orbital  $a$  obtiene una contribución adicional de sus interacciones con otros nucleones.

### Potencial Químico

La cantidad  $\lambda$  se llama potencial químico. Para estudiar su significado se escribe, a partir de  $\mathcal{H} = H - \lambda N$  y (3.20),

$$\mathcal{H}_0 = \langle \text{BCS}|H|\text{BCS}\rangle - \lambda n \quad (3.45)$$

La restricción en el número de partículas significa que la derivada de  $\mathcal{H}_0$  respecto al número de partículas  $n$  debe anularse cuando  $n = \bar{n}$ . Derivando (3.45) respecto a  $n$  e igualándolo a cero da

$$\lambda = \frac{\partial}{\partial n} \langle \text{BCS}|H|\text{BCS}\rangle |_{n=\bar{n}} \quad (3.46)$$

De acuerdo a esta ecuación  $\lambda$  habla sobre cómo la energía del estado fundamental BCS aumenta al agregar una partícula, que no es más que la definición usual del potencial químico.

### 3.4. El programa BCSCONT

En esta sección se hablará de manera concisa sobre la entrada y salida de información del programa utilizado en este trabajo. La función del programa de producción local BCSCONT es la de calcular las soluciones a las ecuaciones de la BCS (3.42), para un potencial esférico simétrico arbitrario. Si bien se puede introducir de manera manual la forma funcional del potencial, la base de datos del programa posee los potenciales Woods-Saxon y Spin-Orbit, entre otros.

En los archivos de entrada se pueden controlar los distintos parámetros de los potenciales, el rango de búsqueda de energía y el número de neutrones, entre otros. Además de esto, se posee con opciones para graficar las magnitudes físicas, así como un archivo de salida con toda la información y parámetros utilizados para poder llevar un seguimiento de los resultados.

#### 3.4.1. Parámetros de los potenciales

Como se vió anteriormente, el Hamiltoniano de un sistema con interacción constante es  $H = \sum_{\alpha} \varepsilon_{\alpha} a_{\alpha}^{\dagger} a_{\alpha} - G \sum_{ac} P_a^{\dagger} P_c$ . El factor  $G > 0$  está parametrizado por el número partículas:

$$G = \frac{\chi_1}{A} (1 - \chi_2 I) = \frac{\chi_1}{A} \left( 1 - \chi_2 \frac{N - Z}{A} \right) \quad (3.47)$$

donde  $\chi_2 = 0,385$  MeV [28] y la constante  $\chi_1$  se ajusta para reproducir los gaps experimentales. El espacio de valencia es calculado a partir de la suma de un potencial Woods-Saxon y un Spin-Orbit [29],

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}, \quad (3.48)$$

$$v_{SO}(r) = -\frac{2}{\hbar^2} \frac{V_{SO}}{ra} \frac{e^{(r-R)/a}}{[1 + e^{(r-R)/a}]^2} \quad (3.49)$$

Los parámetros de campo medio, la difusividad  $a$ , el radio  $r_0$  en  $R = r_0 A^{1/3}$  y las amplitudes  $V_0 = c_0 + c_1 I$  y  $V_{SO} = c_0^{SO} + c_1^{SO} I$  son optimizados a las energías del núcleo menos un neutrón.

## Capítulo 4

# Aplicación a la cadena del estaño

El presente capítulo se enfocará en el estudio de la cadena de isótopos del estaño bajo la aproximación BCS. Se analizará la estructura nuclear y las propiedades de los isótopos del estaño en la línea de goteo de neutrones. El estaño  $^{100}\text{Sn}$  es un núcleo doblemente mágico, lo que significa que tiene una estructura especial y un comportamiento dinámico distinto a otros núcleos. Por lo tanto, el estudio detallado de sus isótopos es importante para comprender mejor la estructura y la dinámica de los núcleos mágicos y para desarrollar una teoría más precisa de la física nuclear.

En este capítulo, se calcularán los gaps de energía, potenciales químicos y cuasienergías del marco teórico de la BCS. Algunos observables como energías de ligadura, probabilidades de ocupación y energías de separación de un y dos neutrones también serán calculados y comparados con valores teóricos y, en caso de existir, valores experimentales. Además, se discutirá la hipótesis partícula-agujero, que juega un papel importante en la descripción de la estructura y la dinámica de los núcleos.

## 4.1. Representación partícula simple

En la línea de goteo del comienzo de la cadena del estaño, se espera que el estado base del núcleo  $^{101}\text{Sn}$  sea  $d_{5/2}$  [4], según una extrapolación de los isótopos más pesados, mientras que el primer estado excitado sería  $g_{7/2}$  [30]. Sin embargo, mediciones sugieren que en realidad se observa el orden inverso [31].

$c_0 = 51,95 \text{ MeV}$	$c_1 = 33,413 \text{ MeV}$
$c_0^{SO} = 11,30 \text{ MeV fm}$	$c_1^{SO} = 9,075 \text{ MeV fm}$
$r_0 = 1,27 \text{ fm}$	$a = 0,70 \text{ fm}$

Tabla 4.1: Parámetros del campo medio que define las fuerzas del campo medio.

Núcleo	Estado	$\varepsilon$ [MeV]	$\varepsilon_{\text{Exp}}$ [MeV]
$^{100}\text{Sn}$	$0g_{7/2}$	-11,100	-11,100
$^{100}\text{Sn}$	$1d_{5/2}$	-10,916	-10,928
$^{132}\text{Sn}$	$1f_{7/2}$	-2,442	-2,402
$^{132}\text{Sn}$	$2p_{3/2}$	-1,395	-1,548

Tabla 4.2: Energías de partícula simple a baja energía para  $^{100}\text{Sn}$  y  $^{132}\text{Sn}$ . La separación de energía entre el estado fundamental y el primer estado excitado del  $^{101}\text{Sn}$  se tomó de [30], mientras que el orden se tomó de [31]. La energía de separación de  $^{101}\text{Sn}$  y  $^{133}\text{Sn}$  proviene de [4].

El espacio modelo de la cadena de estaño se obtiene de sumar la degeneración de los estados de partícula indicados en la Figura 4.1. Se calcularán entonces magnitudes físicas para isótopos del estaño del  $^{102}\text{Sn}$  al  $^{162}\text{Sn}$ . Al tratarse de un rango amplio de masas, se decide considerar las energías de una sola partícula  $\varepsilon_{sp}$  (subíndice  $sp$  proveniente del inglés "single particle energies") dependientes de la masa. Estas energías, presentadas en la Figura 4.1, se calcularon utilizando los parámetros de campo medio en la Tabla 4.1 para los potenciales Woods-Saxon y Spin-Orbit:

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}, \quad V_0 = c_0 + c_1 I$$

$$v_{SO}(r) = -\frac{2}{\hbar^2} \frac{V_{SO}}{ra} \frac{e^{(r-R)/a}}{[1 + e^{(r-R)/a}]^2}, \quad V_{SO} = c_0^{SO} + c_1^{SO} I$$

con  $I = (N - Z)/A$  y siendo  $^{100}\text{Sn}$  el núcleo inerte. Los parámetros fueron ajustados para reproducir lo mejor posible las energías de partícula simple de  $^{101}\text{Sn}$  y  $^{133}\text{Sn}$  a bajas energías mostradas en la Tabla 4.2.

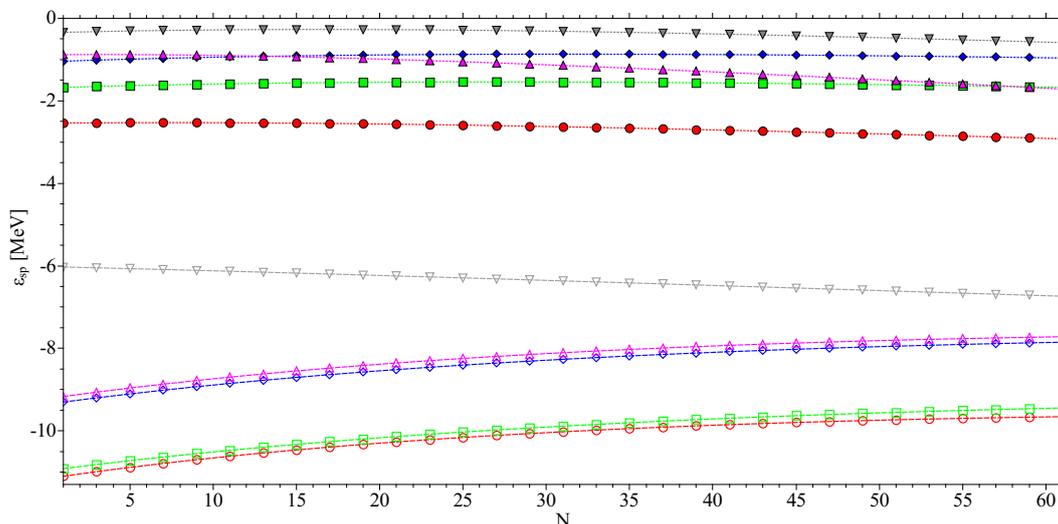


Figura 4.1: Energías de partícula simple en función del número de valencia del núcleo  $^{100}\text{Sn}$ . Las etiquetas  $\circ$   $g_{7/2}$ ,  $\square$   $d_{5/2}$ ,  $\diamond$   $s_{1/2}$ ,  $\triangle$   $d_{3/2}$ ,  $\nabla$   $h_{11/2}$ ,  $\bullet$   $f_{7/2}$ ,  $\blacksquare$   $p_{3/2}$ ,  $\blacklozenge$   $p_{1/2}$ ,  $\blacktriangle$   $h_{9/2}$ ,  $\blacktriangledown$   $f_{5/2}$  indican cada estado de partícula simple.

Los cálculos dan al orbital  $g_{7/2}$  como estado fundamental del  $^{101}\text{Sn}$ , como se ve en la Figura 4.1. Este resultado se ve respaldado por lo indicado por [31], el cual reporta también a  $g_{7/2}$  como el fundamental. Por este motivo se tomará a éste como el estado fundamental del  $^{101}\text{Sn}$ .

## 4.2. Gap de energía

Los gaps calculados se comparan con la siguiente ecuación experimental de cuarto orden [32]

$$\Delta(N) = \frac{1}{8}[B(Z, N + 2) - 4B(Z, N + 1) + 6B(Z, N) - 4B(Z, N - 1) + B(Z, N - 2)] \quad (4.1)$$

donde  $B$  es la energía de ligadura. Las masas experimentales se tomaron de [4, 33]. En los casos donde las masas experimentales no estaban disponibles, se tomaron valores teóricos de [34].

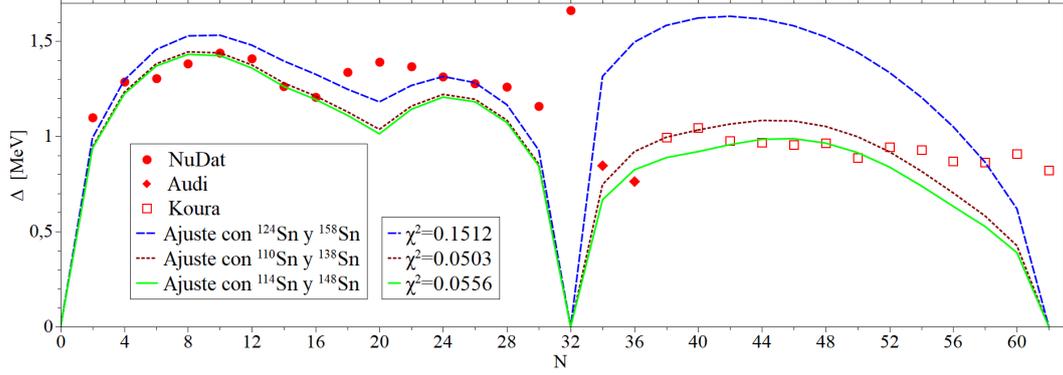


Figura 4.2: Comparación entre la BCS y la ecuación (4.1), se incluyo el coeficiente  $\chi^2 = \sum_n (\Delta_n^{ref} - \Delta_n^{BCS})^2$  de los ajustes respecto a los valores experimentales [4, 33] y teóricos [34].

La Figura 4.2 muestra gaps de energía calculados numéricamente para distintas elecciones del núcleo de referencia. Estos gaps se obtuvieron a partir de haber ajustado el parámetro  $\chi_1$  para los valores de gap experimentales de los núcleos de referencia. Estos valores experimentales se calcularon a partir de los isótopos vecinos y están contenidos en la Tabla 4.3. Se necesita seleccionar un núcleo de referencia en cada capa mayor para calcular numéricamente el gap de energía de todos los isótopos de la cadena del estaño. En el espacio modelo del estaño se cuenta con dos capas mayores: del  $^{100}\text{Sn}$  al  $^{132}\text{Sn}$ , y del  $^{136}\text{Sn}$  al  $^{162}\text{Sn}$ .

$\Delta$ [KeV]	$\chi_1$	$\Delta$ [KeV]	$\chi_1$	$\Delta$ [KeV]	$\chi_1$
$\Delta(^{110}\text{Sn}) = 1429$ [4]	23.228	$\Delta(^{114}\text{Sn}) = 1261$ [4]	28.795	$\Delta(^{124}\text{Sn}) = 1314$ [4]	27.112
$\Delta(^{138}\text{Sn}) = 995$ [34]	26.003	$\Delta(^{148}\text{Sn}) = 964$ [34]	24.879	$\Delta(^{158}\text{Sn}) = 864$ [34]	30.632

Tabla 4.3: Valores del parámetro  $\chi_1$  de la ec. (3.47) para las dos capas mayores que determinan intensidad de la interacción de apareamiento  $G$  en la BCS. Los parámetros de gap  $\Delta$  se calcularon usando la ecuación (4.1) con valores de [4, 34].

Las capas mayores, o simplemente capas, están delimitadas por los valores de  $N$  para los cuales el isótopo pierde su carácter superconductor. En la porción de la cadena del estaño analizada, se ve que los isótopos  $^{132}\text{Sn}$  y  $^{162}\text{Sn}$  poseen un gap de energía  $\Delta = 0$  MeV numéricamente calculado, lo cual, sumando el hecho que  $^{100}\text{Sn}$  es un núcleo normal [1] define dos capas: una para los isótopos  $^{100}\text{Sn}$  al  $^{132}\text{Sn}$ , y otra del  $^{132}\text{Sn}$  al  $^{162}\text{Sn}$ .

Se observa que el comportamiento cualitativo de la segunda capa es siempre igual, independiente de qué núcleo de referencia se tome en la capa  $32 < N < 62$ . Esto se debe a que los datos teóricos [33, 34] surgen de extrapolaciones de los valores experimentales disponibles de núcleos más ligeros. En esta extrapolación se pierde información por lo que no comparten la misma monotonía. Estos gaps de referencia se calcularon usando la ecuación 4.1, salvo para el  $^{132}\text{Sn}$  donde esta ecuación no es válida [32].

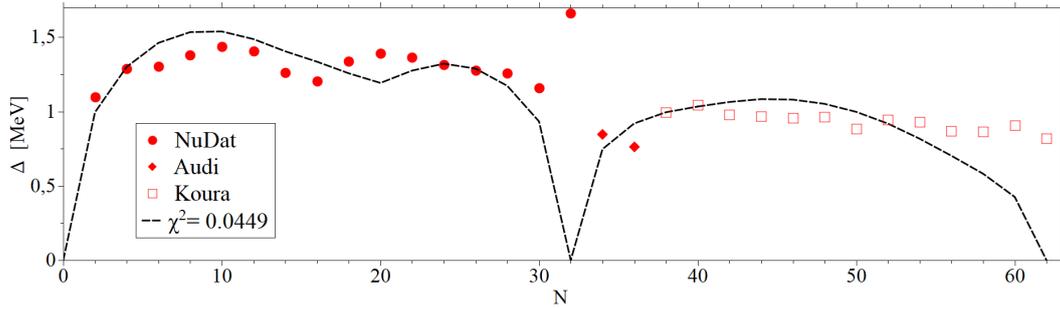


Figura 4.3: Gap de apareamiento numérico calculado con los parámetros de ajuste  $\chi_1 = 25,248$  para la primera capa y  $\chi_1 = 25,314$  para la segunda capa.

Al tomar un gap de referencia con  $N > 54$  cerca del final de la segunda capa, la BCS estima por demás los gaps de energía en la segunda capa, como se puede ver en la curva azul en la Figura 4.2. Por otro lado, tomar un gap de referencia de un isótopo cercano al comienzo de la primera capa resulta en valores de gaps de energías menores a los experimentales para  $16 < N < 32$ .

Se observa que la BCS siempre da un valor  $\Delta = 0$  MeV para  $^{132}\text{Sn}$  y  $^{162}\text{Sn}$ . Esto indicaría que estos núcleos dejan de ser superconductores, lo cual está en desacuerdo con [33, 34]. Esta falencia de la BCS puede solventarse adicionando un término cuadrático en  $N$  al Hamiltoniano auxiliar:  $\mathcal{H} = H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2$ . Esta modificación da origen al modelo de Lipkin-Nogami [35].

La Figura 4.3 muestra la solución de la BCS que surge de tomar parámetros  $\chi_1 = 25,248$  para la primera capa y  $\chi_1 = 25,314$  para la segunda capa. Estos valores se determinaron numéricamente de manera que minimicen el coeficiente  $\chi^2$  mediante el algoritmo de optimización de Levenberg-Marquardt. Los parámetros  $\chi_1$  utilizados en la Figura 4.3, así como los del Tabla 4.1 son con los que se calcularon las energías de la Figura 4.1.

### 4.3. Simetría partícula-agujero

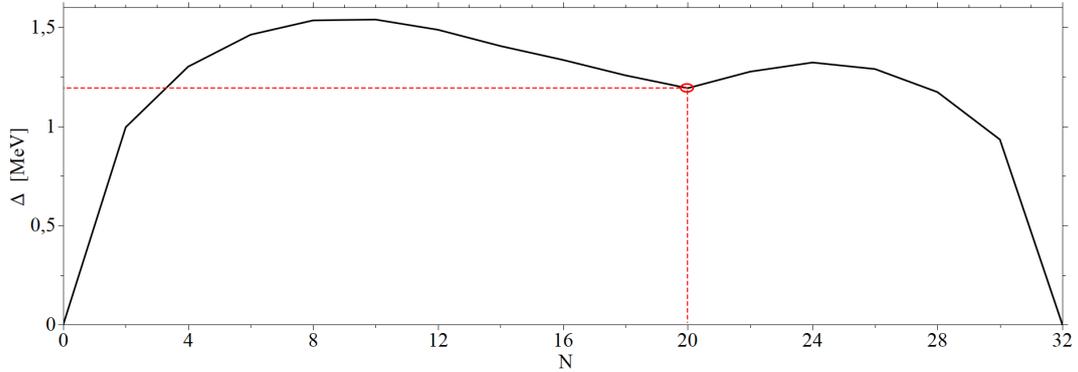


Figura 4.4: Gaps de energía para isótopos del  $^{100}\text{Sn}$  a  $^{132}\text{Sn}$ . Indicado en rojo hay un mínimo local del gap de energía para  $^{120}\text{Sn}$ .

Una de las características de las capas principales es que al agregar partículas al comienzo de la capa, el gap de energía aumenta. Por otro lado, al retirar partículas del final de una capa llena, se produce una disminución en el gap de energía.

N	G [MeV]										
2	0,245	4	0,239	6	0,232	8	0,226	22	0,192	24	0,187
18	0,200	16	0,205	14	0,210	12	0,215	30	0,176	28	0,180

Tabla 4.4: Intensidades  $G$  para distintos números de valencia del núcleo  $^{100}\text{Sn}$ .

Una hipótesis interesante de estudiar es la simetría partícula-agujero. La misma plantea que, en los núcleos normales como el  $^{100}\text{Sn}$  o  $^{132}\text{Sn}$ , agregar un agujero o quitar una partícula resulta en el mismo gap de energía. La simetría partícula-agujero es una propiedad de ciertos sistemas cuánticos de muchos cuerpos donde los niveles de energía del espectro después de haber adicionado  $k$  partículas al sistema original son iguales, hasta un desplazamiento uniforme, que el espectro del sistema partículas del sistema complementario en el que se quitaron  $k$  partículas. Esto significa que para cada nivel de energía en un sistema, hay un nivel de energía correspondiente en el otro sistema con la misma energía pero paridad opuesta [36].

La Figura 4.4 muestra la solución numérica en la BCS para los gaps de energía. Se ha

observado la presencia de un mínimo local de gap en  $^{120}\text{Sn}$ . Esto motiva considerar dos capas secundarias dentro de la capa principal: una capa para  $0 < N \leq 20$  y otra para  $20 < N < 32$ .

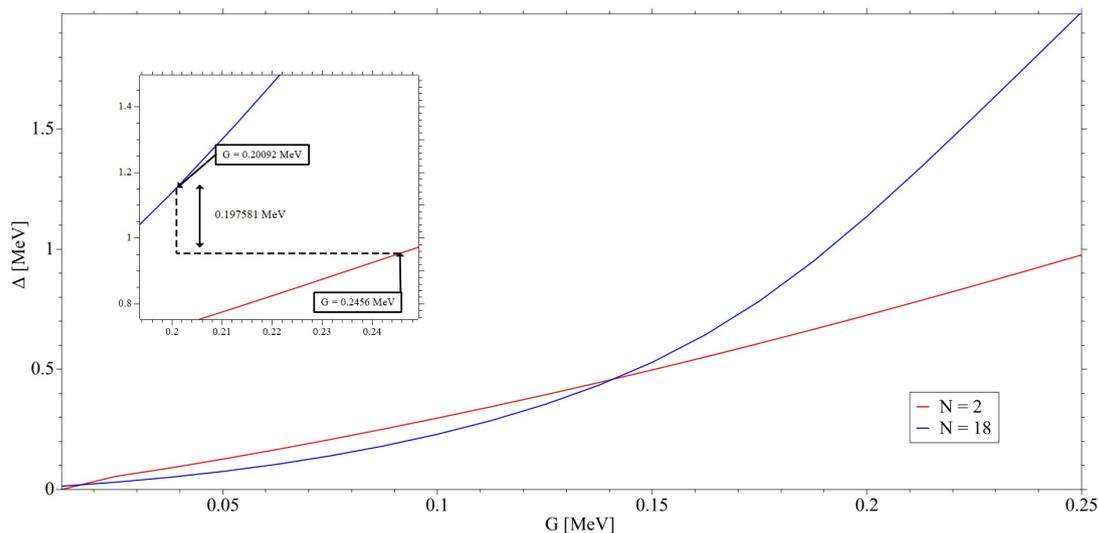


Figura 4.5: Gaps de energía en función de la intensidad  $G$  para  $^{102}\text{Sn}$  y  $^{118}\text{Sn}$ .

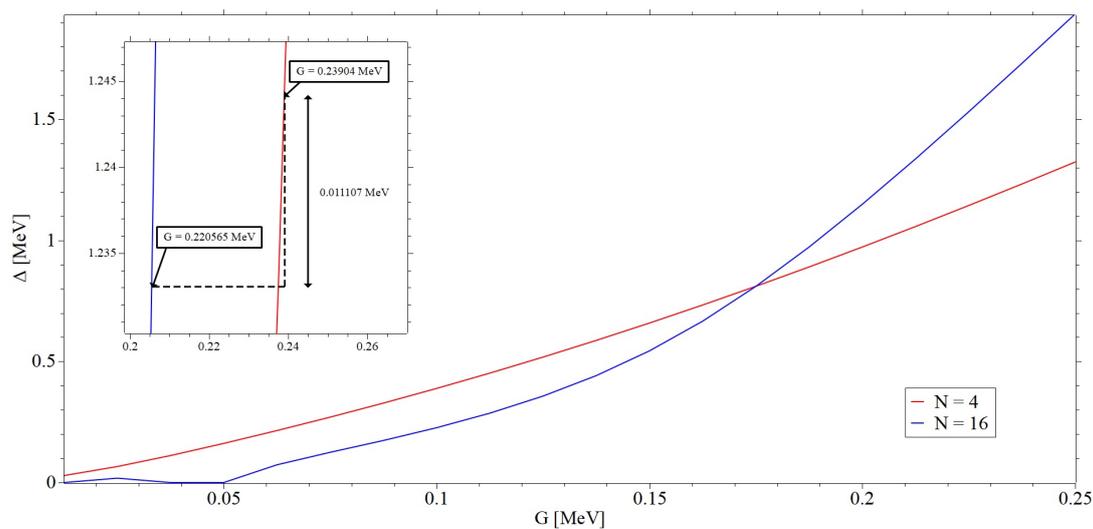


Figura 4.6: Gaps de energía en función de la intensidad  $G$  para  $^{104}\text{Sn}$  y  $^{116}\text{Sn}$ .

Las Figuras 4.5 y 4.6 muestran el gap de energía en función la intensidad  $G$  para las parejas de isótopos ( $^{102}\text{Sn}, ^{118}\text{Sn}$ ) y ( $^{104}\text{Sn}, ^{116}\text{Sn}$ ) respectivamente. Las parejas se eligieron basadas en los valores de la BCS, mostrados en la Figura 4.4. Las intensidades  $G$  comparadas se obtuvieron de la Tabla 4.4. La Figura 4.5 muestra que no se observa la simetría partícula-agujero para los

núcleos  $^{102}\text{Sn}$  y  $^{118}\text{Sn}$  puesto que la diferencia entre los gaps de energía considerados es del mismo orden que las intensidades  $G$ . Por otro lado, en la Figura 4.6 sí se aprecia esta simetría, ya que la diferencia de entre los gaps es del orden de  $10^{-2}$  MeV. Además, esta figura muestra que para valores de  $G$  menores a 0,05 MeV se obtiene un gap de energía nulo. La posibilidad de observar soluciones triviales a la ecuación del gap está contemplado en la forma de la ecuación (3.36).

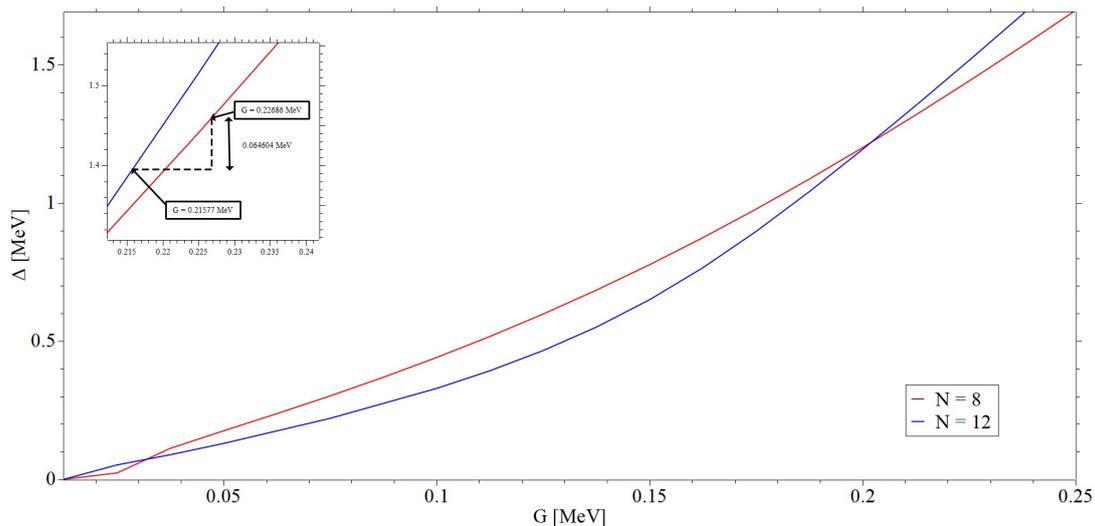


Figura 4.7: Gaps de energía en función de la intensidad  $G$  para  $^{108}\text{Sn}$  y  $^{112}\text{Sn}$ .

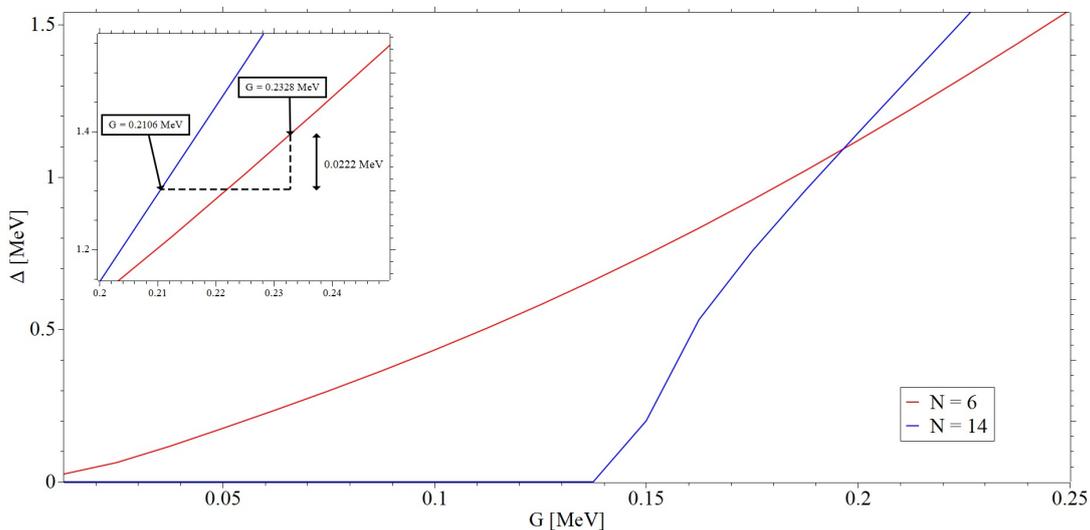


Figura 4.8: Gaps de energía en función de la intensidad  $G$  para  $^{106}\text{Sn}$  y  $^{114}\text{Sn}$ .

La Figura 4.7 muestra que los cálculos numéricos presentan la simetría partícula-agujero para

los núcleos  $^{108}\text{Sn}$  y  $^{112}\text{Sn}$ . Lo mismo ocurre para el par ( $^{106}\text{Sn}, ^{114}\text{Sn}$ ) como se ve en la Figura 4.8: la diferencia entre los gaps de energía considerados es dos ordenes de magnitud menor a las intensidades  $G$  en juego. En esta figura se observa además la solución trivial a la ecuación del gap (3.36) para valores de  $G$  menores a 0,14 MeV.

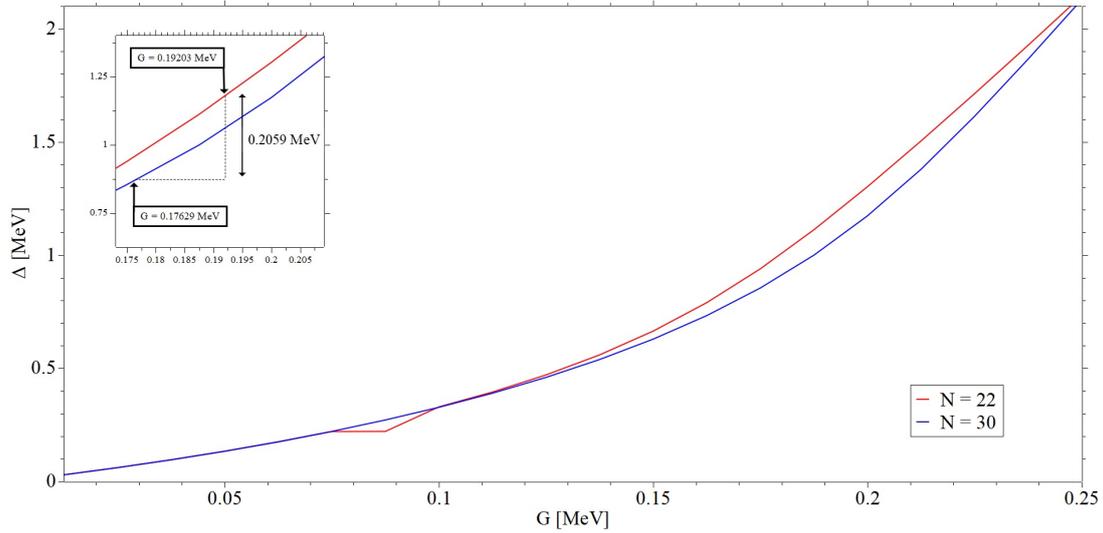


Figura 4.9: Gaps de energía en función de la intensidad  $G$  para  $^{122}\text{Sn}$  y  $^{130}\text{Sn}$ .

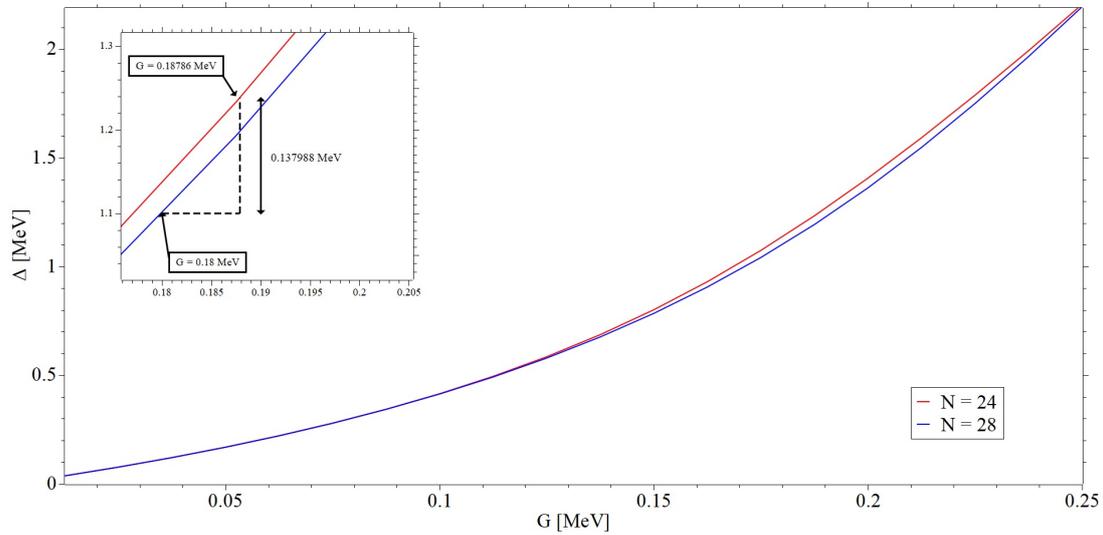


Figura 4.10: Gaps de energía en función de la intensidad  $G$  para  $^{124}\text{Sn}$  y  $^{128}\text{Sn}$ .

Las Figuras 4.9 y 4.10 corresponden a los gaps de energía de las parejas de núcleos de la segunda capa menor (isótopos entre  $^{120}\text{Sn}$  y  $^{132}\text{Sn}$ ). No se observa la simetría partícula-agujero

entre estos núcleos emparejados. En la Figura 4.9 se ve que la diferencia entre los gaps de energía considerados es del mismo orden de magnitud que las intensidades  $G$ . Lo mismo ocurre para los isótopos  $^{124}\text{Sn}$  y  $^{128}\text{Sn}$  (ver Figura 4.10).

#### 4.4. Energías efectivas de partícula simple

Es de interés observar cómo son corregidas las energías de partícula simple de la Figura 4.1 al incluir la información del sistema de muchas partículas. Esto se logra con las energías

$$e_k(N) = \varepsilon_k(N) - Gv_k^2(N) \quad (4.2)$$

Estas energías se interpretan como niveles de energía efectivos de una partícula, al estar corregidas por un término  $G \times v^2$ . La Figura 4.11 muestra la evolución de las energías  $e_n$  de la ecuación (4.2) en función del número de valencia  $N$ . Se observa un comportamiento monótono con la misma estructura de capas y subcapas como las energías de campo medio. Esto indica que el apareamiento no destruye la estructura de capas, pero puede reordenarla, como ocurre con los estados (■)  $p_{3/2}$ , (◆)  $p_{1/2}$ , (▲)  $h_{9/2}$ ,

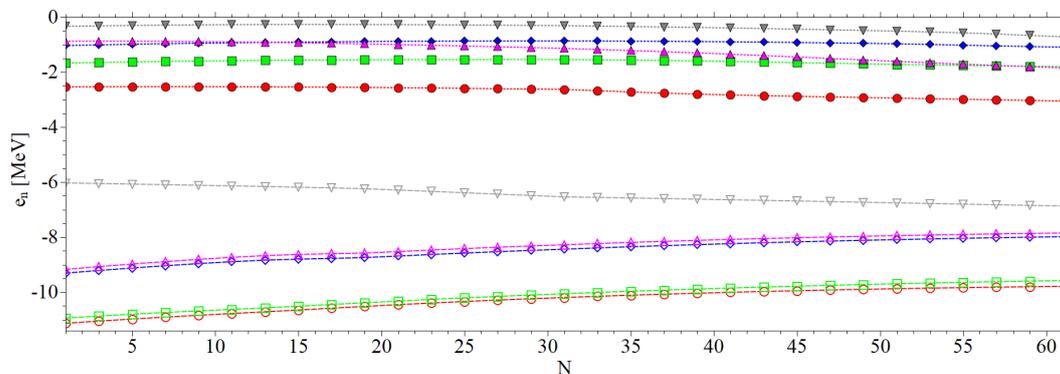


Figura 4.11: Energías efectivas  $e_n(N)$  en función del número de valencia del  $^{100}\text{Sn}$ . Las etiquetas  $\circ$   $g_{7/2}$ ,  $\square$   $d_{5/2}$ ,  $\diamond$   $s_{1/2}$ ,  $\triangle$   $d_{3/2}$ ,  $\nabla$   $h_{11/2}$ ,  $\bullet$   $f_{7/2}$ ,  $\blacksquare$   $p_{3/2}$ ,  $\blacklozenge$   $p_{1/2}$ ,  $\blacktriangle$   $h_{9/2}$ ,  $\blacktriangledown$   $f_{5/2}$  indican cada estado de partícula simple.

La Figura 4.12 compara las energías de partícula simple de los orbitales  $g_{7/2}$ ,  $s_{1/2}$  y  $p_{1/2}$  con

las respectivas energías efectivas (4.2). La separación entre éstas es muy pequeña para todos los isótopos analizados, como se puede esperar del orden de magnitud del término  $G \times v_n^2$ . Se observa que la interacción de apareamiento constante eleva los niveles de energía de partícula simple.

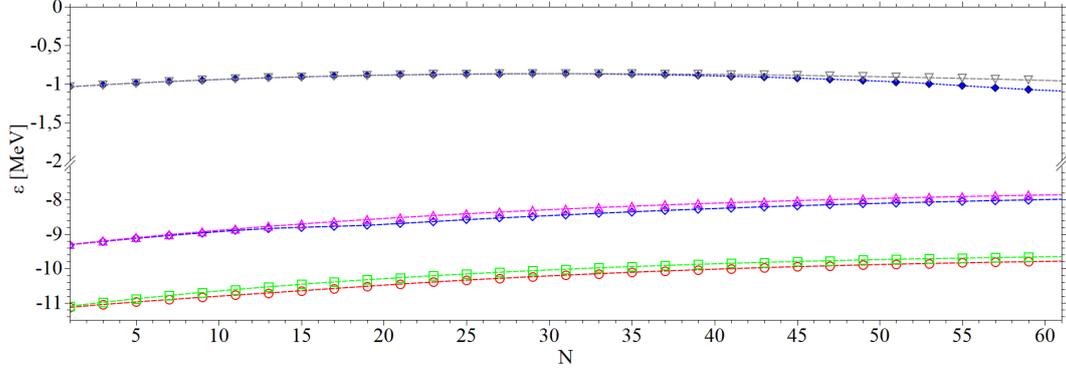


Figura 4.12: Comparación entre  $\varepsilon_n(N)$  y  $e_n(N)$  para ciertos niveles de energía de interés. Se identifican los niveles de energía por:  $\circ g_{7/2}^{efec}$ ,  $\square g_{7/2}$ ,  $\diamond s_{1/2}^{efec}$ ,  $\triangle s_{1/2}$ ,  $\blacklozenge p_{1/2}^{efec}$ ,  $\nabla p_{1/2}$ .

Es remarcable que en los estados de poca energía se llega a un máximo de separación a la mitad de la primera capa  $N = 19$ . Esto condice con el hecho que, para isótopos del medio de la primera capa, los orbitales con mayor probabilidad de ocupación son  $g_{7/2}$  seguido del  $s_{1/2}$ . Más probabilidades de ocupación de los niveles de partícula simple se estudian en la siguiente sección.

## 4.5. Nivel de Fermi

La Figura 4.13 muestra el nivel de Fermi o potencial químico  $\lambda$  en función del número de valencia para isótopos pares en la cadena del estaño. Se observa un comportamiento lineal en el potencial químico, con un salto en  $N = 34$  justo al comienzo de la segunda capa.

Se ve que para todos los isótopos estudiados la energía de Fermi es negativa. Un cambio de signo ocurre para isótopos con  $N > 62$ , como se puede ver en los valores ( $\bullet$ ) extrapolados, lo que indicaría la ubicación de la línea de goteo de neutrones para el estaño, esto es,  $^{162}\text{Sn}$  sería el último isótopo ligado.

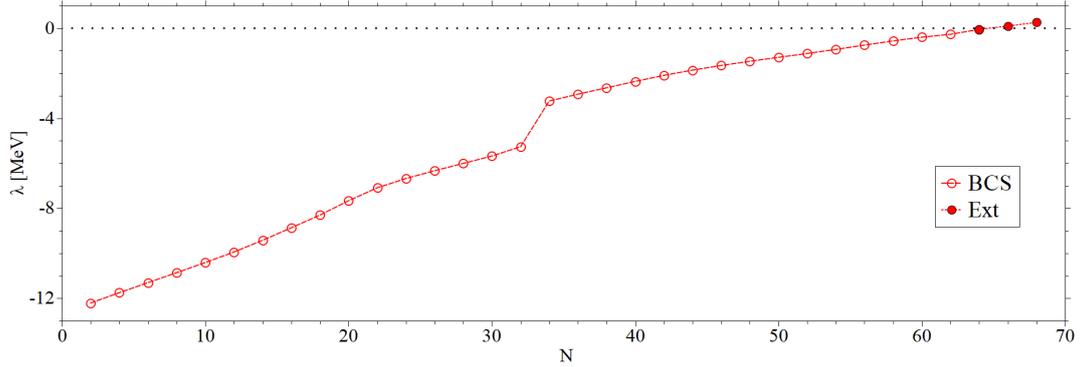


Figura 4.13:  $\lambda$  en función del número de valencia del núcleo de  $^{100}\text{Sn}$ ; ( $\circ$ ) corresponde a valores numéricos y ( $\bullet$ ) a valores extrapolados a partir de los tres valores anteriores.

## 4.6. Cuasienergías y probabilidades de ocupación

A continuación se presentan los resultados de las quasienergías así como las probabilidades de ocupación en el modelo BCS en la cadena del estaño. Estos se calcularon a partir de los parámetros de la ecuación (3.47)  $\chi_1 = 25, 248$  para la primera capa ( $0 < N < 32$ ) y  $\chi_1 = 25, 314$  para la segunda capa ( $32 < N < 62$ ). La Tabla 4.5 contiene las intensidades  $G = G(\Delta)$  también calculadas numéricamente a partir de los parámetros  $\chi_1$  previamente indicados.

$\Delta$ [MeV]	G [MeV]						
0,953	0,245	1,178	0,192	1,186	0,154	1,151	0,200
1,244	0,239	1,238	0,187	1,176	0,151	1,064	0,196
1,395	0,232	1,211	0,183	1,142	0,148	1,149	0,160
1,459	0,226	1,100	0,180	1,084	0,146	1,175	0,157
1,455	0,221	0,868	0,176	1,001	0,143	0,463	0,134
1,394	0,215	0,836	0,169	0,895	0,141	.....	.....
1,302	0,210	1,022	0,166	0,773	0,138	.....	.....
1,233	0,205	1,106	0,163	0,638	0,136	.....	.....

Tabla 4.5: Intensidad del apareamiento constante para distintos valores de gap de energía. Valores calculados a partir de los parámetros de ajuste  $\chi_1 = 25, 248$  y  $\chi_1 = 25, 314$  de la ecuación (3.47).

## Cuasienergías

La Figura 4.14 muestra el desarrollo de las energías de cuasipartícula a lo largo de la cadena de estaño en relación con el número de valencia  $N$  del carozo  $^{100}\text{Sn}$ . El orden de los estados de menor energía al comienzo de la primera capa es  $g_{7/2}$ ,  $d_{5/2}$ ,  $s_{1/2}$ ,  $d_{3/2}$ ,  $h_{11/2}$ , similar al de la referencia [37], con la excepción del estado  $g_{7/2}$  que aparece en cuarto lugar. Los estados de menor energía al comienzo de la segunda capa son  $f_{7/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $h_{9/2}$ ,  $p_{1/2}$ ,  $f_{5/2}$  y en [37] es  $f_{7/2}$ ,  $p_{3/2}$ ,  $p_{1/2}$ ,  $f_{5/2}$ ,  $h_{9/2}$ .

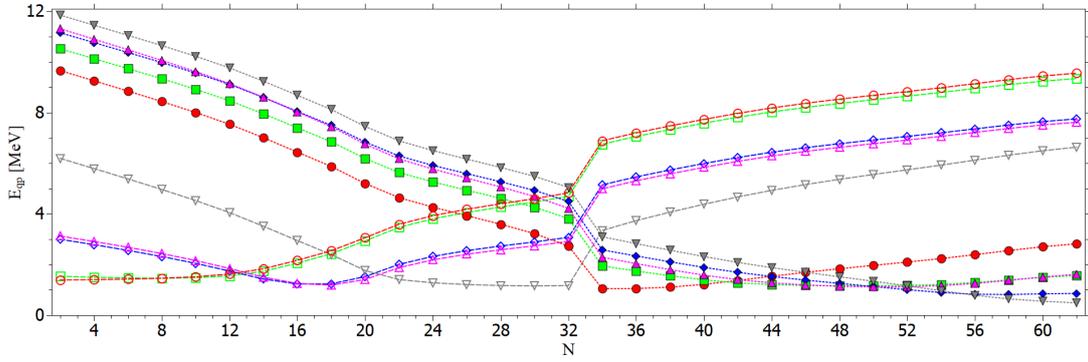


Figura 4.14: Cuasienergías como función del número de valencia en el núcleo  $^{100}\text{Sn}$ . Las etiquetas  $\circ$   $g_{7/2}$ ,  $\square$   $d_{5/2}$ ,  $\diamond$   $s_{1/2}$ ,  $\triangle$   $d_{3/2}$ ,  $\nabla$   $h_{11/2}$ ,  $\bullet$   $f_{7/2}$ ,  $\blacksquare$   $p_{3/2}$ ,  $\blacklozenge$   $p_{1/2}$ ,  $\blacktriangle$   $h_{9/2}$ ,  $\blacktriangledown$   $f_{5/2}$  indican cada estado.

A medida que aumenta el valor de  $N$ , la cuasienergía disminuye entre las dos capas, como se ve en la Figura 4.14, hasta la finalización de la primera capa en  $N = 32$ . La BCS presenta un cruce repentino en el isótopo  $^{132}\text{Sn}$ . Se sabe que el estado base del núcleo  $^{103}\text{Sn}$  es el estado  $d_{5/2}$  [38]. Sin embargo, en la Figura 4.14 se observa que el cruce entre los estados  $g_{7/2}$  y  $d_{5/2}$  ocurre para el núcleo  $^{109}\text{Sn}$ .

## Probabilidades de ocupación

En la BCS, la probabilidad de ocupación de un estado cuántico de una partícula es dada por  $v_k^2$ . La Figura 4.15 muestra esta probabilidad en función del número de valencia  $N$  del carozo  $^{100}\text{Sn}$ . Se observa que para los isótopos en la primera capa ( $0 < N < 32$ ) los estados de mayor

energía se encuentran desocupados, como se esperaba [39]. Dentro de la primera capa, los orbitales  $h_{11/2}, d_{3/2}, s_{1/2}, d_{5/2}, g_{7/2}$  tienen una ocupación que aumenta suavemente, siendo  $d_{5/2}, g_{7/2}$  los dos orbitales con mayor ocupación hasta  $N = 14$ . El estado con mayor probabilidad de ocupación en esta capa es  $g_{7/2}$ , seguido por  $d_{5/2}, s_{1/2}, d_{3/2}, h_{11/2}$ , respectivamente, mientras que el resto de orbitales tienen una ocupación nula. A partir del núcleo  $^{132}\text{Sn}$ , los orbitales  $f_{7/2}, p_{3/2}, h_{9/2}, p_{1/2}, f_{5/2}$  comienzan a ocuparse respetando ese orden de jerarquía, puesto los orbitales  $h_{11/2}, d_{3/2}, s_{1/2}, d_{5/2}, g_{7/2}$  se encuentra completamente ocupados.

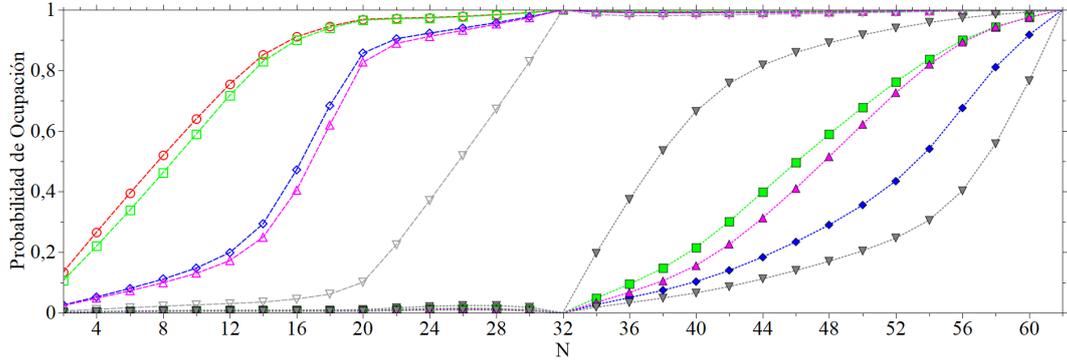


Figura 4.15: Probabilidad de ocupación de los estados de una partícula. Las etiquetas  $\circ$   $g_{7/2}$ ,  $\square$   $d_{5/2}$ ,  $\diamond$   $s_{1/2}$ ,  $\triangle$   $d_{3/2}$ ,  $\nabla$   $h_{11/2}$ ,  $\bullet$   $f_{7/2}$ ,  $\blacksquare$   $p_{3/2}$ ,  $\blacklozenge$   $p_{1/2}$ ,  $\blacktriangle$   $h_{9/2}$ ,  $\blacktriangledown$   $f_{5/2}$  indican cada estado.

Es interesante observar también la probabilidad de ocupación como función de las energías efectivas (4.11). A modo explicativo, la Figura 4.16 muestra la probabilidad de ocupación  $v_a^2$  del  $^{120}\text{Sn}$  de los distintos orbitales  $\alpha$  del espacio de valencia. En la figura se incluye también la función

$$f(x) = \frac{1}{2} - \frac{x - \lambda}{2\sqrt{(x - \lambda)^2 + \Delta^2}} = \left[ \frac{1}{2} - \frac{x + 7,061}{2\sqrt{(x + 7,061)^2 + 1,134}} \right] \text{ MeV} \quad (4.3)$$

donde  $\lambda$  y  $\Delta$  son el potencial químico y el gap de energía del  $^{120}\text{Sn}$ , respectivamente. La función  $f(x)$  representa a la probabilidad de ocupación del  $^{120}\text{Sn}$  si la energía efectivas de partícula simple (4.11) varían continuamente.

Una forma de interpretar la Figura 4.16 es la siguiente. Se observa que a muy bajas energías, el  $^{120}\text{Sn}$  tiene muy altas probabilidades de ocupar los orbitales de menor energía  $g_{7/2}$  y  $d_{5/2}$ . Por otro lado, a altas energías ( $\approx -2$  MeV) el  $^{120}\text{Sn}$  tiene muy pocas probabilidades de ocupar los

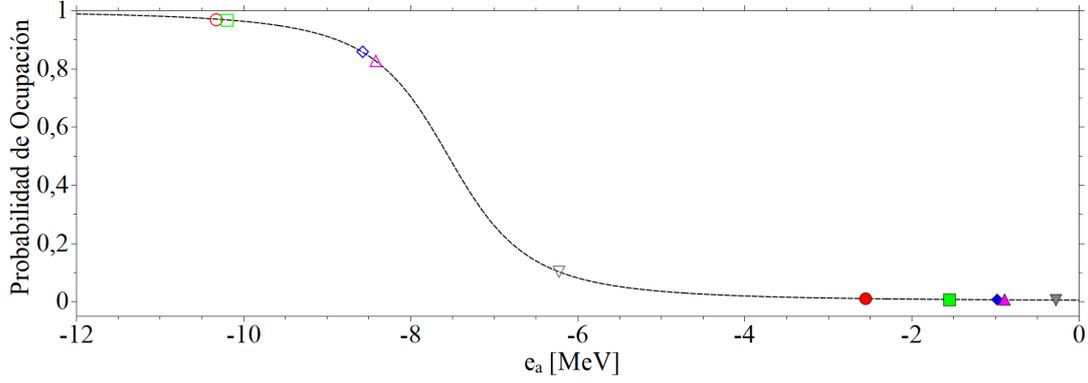


Figura 4.16: Probabilidad de ocupación del  $^{120}\text{Sn}$ . Las etiquetas  $\circ$   $g_{7/2}$ ,  $\square$   $d_{5/2}$ ,  $\diamond$   $s_{1/2}$ ,  $\triangle$   $d_{3/2}$ ,  $\nabla$   $h_{11/2}$ ,  $\bullet$   $f_{7/2}$ ,  $\blacksquare$   $p_{3/2}$ ,  $\blacklozenge$   $p_{1/2}$ ,  $\blacktriangle$   $h_{9/2}$ ,  $\blacktriangledown$   $f_{5/2}$  indican cada estado.

estados de altas energías  $p_{3/2}$ ,  $p_{1/2}$ ,  $h_{9/2}$ . La Figura 4.17 extiende este análisis a otros isótopos.

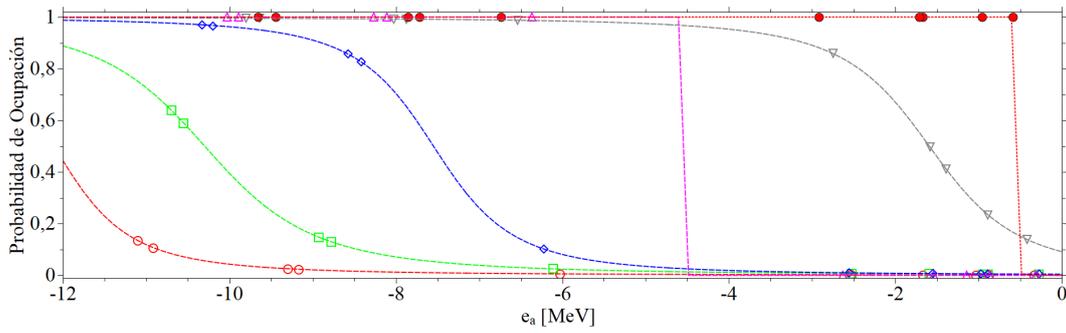


Figura 4.17: Probabilidad de ocupación de  $\circ$   $^{102}\text{Sn}$ ,  $\square$   $^{110}\text{Sn}$ ,  $\diamond$   $^{120}\text{Sn}$ ,  $\triangle$   $^{132}\text{Sn}$ ,  $\nabla$   $^{146}\text{Sn}$  y  $\bullet$   $^{162}\text{Sn}$ .

Se observa que a altas energías, los orbitales ocupados son ocupados por isótopos de alto número de valencia. A medida que disminuye la energía, núcleos con menor número de valencia empiezan suavemente a tener mayor probabilidad de ocupar orbitales. La excepción a este comportamiento suave son los isótopos  $^{132}\text{Sn}$  y  $^{162}\text{Sn}$ , los cuáles son los únicos núcleos no superconductores en la aproximación BCS. Esto se aprecia en su evolución abrupta y discontinua.

## 4.7. Energía de ligadura y energías de separación de neutrones

En esta sección, se presentan los resultados de la energía de ligadura, la energía de separación de un neutrón y dos neutrones para los isótopos del estaño. Estos se calcularon a partir de los parámetros de la ecuación (3.47)  $\chi_1 = 25,248$  para la primera capa ( $0 < N < 32$ ) y  $\chi_1 = 25,314$  para la segunda capa ( $32 < N < 62$ ). Los valores obtenidos se comparan con los valores reportados por [37, 40] y con los datos experimentales disponibles en [41].

### Energía de ligadura

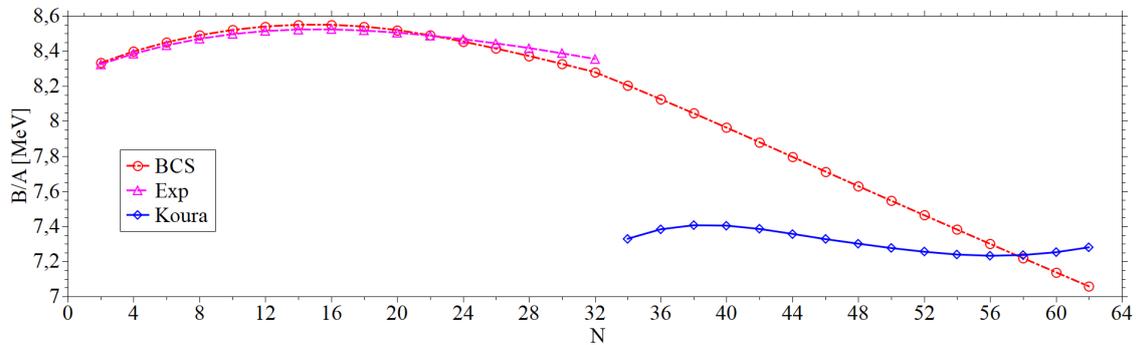


Figura 4.18: Energía de ligadura por partícula ( $\circ$ ) calculada numéricamente para la cadena de estaño. Los valores ( $\triangle$ ) experimentales se reportan en [41]; los ( $\diamond$ ) teóricos se informan en [34].

La energía de ligadura  $B$  en la aproximación BCS se obtiene como

$$B(N) = \left[ \frac{B(^{100}\text{Sn}) - E_{BCS}(N)}{N + 100} \right] A \quad (4.4)$$

donde el valor experimental  $B(^{100}\text{Sn}) = 825,3 \text{ MeV}$  [41] y

$$E_{BCS}(N) = -\frac{\Delta_N^2}{G_N} + \frac{1}{2} \sum_k (2j_k + 1) v_k^2(N) \left[ 2\varepsilon_k(N) - G_N v_k^2(N) \right] \quad (4.5)$$

La última sumatoria en  $k$  se debe realiza sobre el espacio de valencia, a ser,  $k = g_{7/2}, d_{5/2}, s_{1/2}, d_{3/2}, h_{11/2}, f_{7/2}, p_{3/2}, p_{1/2}, h_{9/2}, f_{5/2}$ . En la bibliografía, la energía de ligadura se reporta

usualmente por unidad de nucleón, es decir,  $B(N)/A = [B(^{100}\text{Sn}) - E_{BCS}(N)]/(N + 100)$ .

La Figura 4.18 muestra la energía de ligadura por nucleón de los isótopos del  $^{100}\text{Sn}$  en función del número de valencia. El máximo de energía de ligadura sucede en  $N = 16$ , lo cual concuerda con los datos experimentales. A partir de  $N = 32$  la teoría BCS no concuerda con los valores teóricos de [34]; la solución numérica muestra un comportamiento lineal a diferencia del sinusoidal de los datos teóricos. La Figura 4.18 muestra que para los isótopos con  $2 \leq N \leq 24$  la BCS sobreestima la energía de ligadura, mientras que para  $N > 24$  da valores menores a las mediciones de [41].

## Energía de separación de dos neutrones

La energía de separación de dos neutrones es calculada como

$$S_{2n}(N) = E_{BCS}(N - 2) - E_{BCS}(N). \quad (4.6)$$

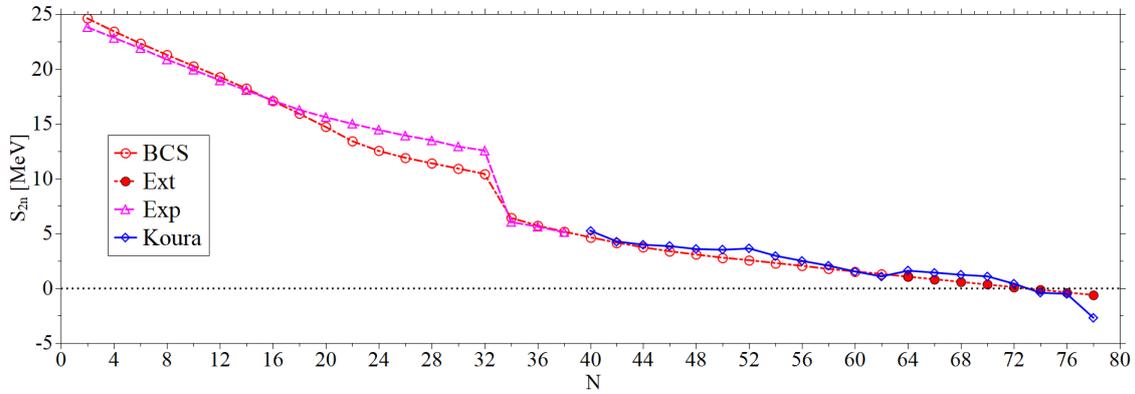


Figura 4.19: Energía de separación  $S_{2n}(N)$  calculada numéricamente ( $\circ$ ) para los isótopos del estaño. Los valores extrapolados ( $\bullet$ ) se obtuvieron tomando los tres valores previos. Los valores experimentales ( $\triangle$ ) se reportan en [33] y los valores teóricos ( $\diamond$ ) en [34].

La Figura 4.19 muestra la energía de separación de dos de neutrones como función del número de valencia  $N$  del carozo  $^{100}\text{Sn}$ . Se aprecia una buena correspondencia con los experimentos hasta  $^{118}\text{Sn}$ . A partir de este isótopo, la aproximación BCS comienza a alejarse de los valores

experimentales, hasta un máximo de 2 MeV para  $^{132}\text{Sn}$ . A pesar de este extraño comportamiento al final de la primera capa, la concordancia para los núcleos  $^{134}\text{Sn}$  a  $^{138}\text{Sn}$  es remarcable. Para isótopos mayores a  $^{138}\text{Sn}$  los valores numéricos no discrepan significativamente de los valores teóricos reportados por [34]. Se realizó una extrapolación de los valores numéricos y se observa que tanto los valores extrapolados ( $\bullet$ ) como los valores teóricos predicen un cambio del signo de  $S_{2n}$  a partir del  $^{172}\text{Sn}$ .

Se sabe que la energía de separación de dos neutrones se comporta aproximadamente como  $S_{2n}(N) \approx -2\lambda(N-1)$  en las cercanías de la línea de goteo [42]. En la aproximación BCS se toma  $\lambda(N-1)$  como el nivel de Fermi del núcleo  $N$  par. Luego, la energía de Fermi y la energía de separación de dos neutrones deberían cambiar de signo a partir del mismo núcleo. Este fenómeno no fue capturado como se puede observar en las Figs. 4.13 ( $^{164}\text{Sn}$ ) y 4.19 ( $^{170}\text{Sn}$ ). Esto se debe a dos cuestiones.

La primera es que en esta aproximación no se están considerando estados del continuo, por lo que información se está perdiendo por este motivo. La otra cuestión a destacar es que la aproximación BCS llega hasta  $N = 62$ , por lo que los valores ( $\bullet$ ) mayores al  $^{162}\text{Sn}$  se debieron extrapolar a partir de los tres valores numéricos previos. Esta extrapolación se hizo tomando hasta los últimos siete isótopos y siempre se mantuvo el mismo comportamiento suave y lineal.

## Energía de separación de un neutrón

En la teoría BCS la energía de separación de un neutrón se calcula como [42]

$$S_n(N-1) = \frac{1}{4}[-3\lambda(N) - \lambda(N-2)] - E_{min}(N) \quad (4.7)$$

donde  $E_{min}$  es la menor de las cuasienergías para un dado núcleo. La Tabla 4.6 contiene los mínimos de cuasienergías. La ecuación anterior no es válida para los isótopos  $^{101}\text{Sn}$  y  $^{133}\text{Sn}$  [42].

La Figura 4.20 compara esta energía calculada en la aproximación BCS con ( $\triangle$ ) datos experimentales de [41] y valores ( $\diamond$ ) teóricos de [34]. La diferencia con los valores experimentales

N	$E_{min}$ [MeV]	N	$E_{min}$ [MeV]	N	$E_{min}$ [MeV]	N	$E_{min}$ [MeV]
4	1,405 ( $g_{7/2}$ )	20	1,412 ( $d_{3/2}$ )	36	1,055 ( $f_{7/2}$ )	52	1,009 ( $p_{1/2}$ )
6	1,426 ( $g_{7/2}$ )	22	1,410 ( $h_{11/2}$ )	38	1,110 ( $f_{7/2}$ )	54	0,899 ( $p_{1/2}$ )
8	1,461 ( $g_{7/2}$ )	24	1,281 ( $h_{11/2}$ )	40	1,220 ( $f_{7/2}$ )	56	0,788 ( $f_{5/2}$ )
10	1,482 ( $d_{5/2}$ )	26	1,212 ( $h_{11/2}$ )	42	1,279 ( $p_{3/2}$ )	58	0,644 ( $f_{5/2}$ )
12	1,554 ( $d_{5/2}$ )	28	1,174 ( $h_{11/2}$ )	44	1,211 ( $p_{3/2}$ )	60	0,553 ( $f_{5/2}$ )
14	1,428 ( $s_{1/2}$ )	30	1,157 ( $h_{11/2}$ )	46	1,177 ( $p_{3/2}$ )	62	0,489 ( $f_{5/2}$ )
16	1,235 ( $s_{1/2}$ )	32	1,174 ( $h_{11/2}$ )	48	1,144 ( $h_{9/2}$ )	...	.....
18	1,188 ( $d_{3/2}$ )	34	1,050 ( $f_{7/2}$ )	50	1,120 ( $h_{9/2}$ )	...	.....

Tabla 4.6: Mınimos de cuasienergıa para distintos valores del numero de valencia  $N$  de  $^{100}\text{Sn}$ .

disminuye hasta  $N = 19$  al mismo ritmo que los valores experimentales. Luego, la BCS comienza a separarse de los valores de referencia hasta un maximo de 1 MeV al final de la primera capa en  $N = 31$ . Al comienzo de la segunda capa los valores de la BCS vuelven a estar en acuerdo con los datos experimentales disponibles. El comportamiento de los valores teoricos es reproducido con la BCS, exceptuando una discrepancia de 1 MeV para el  $^{151}\text{Sn}$ .

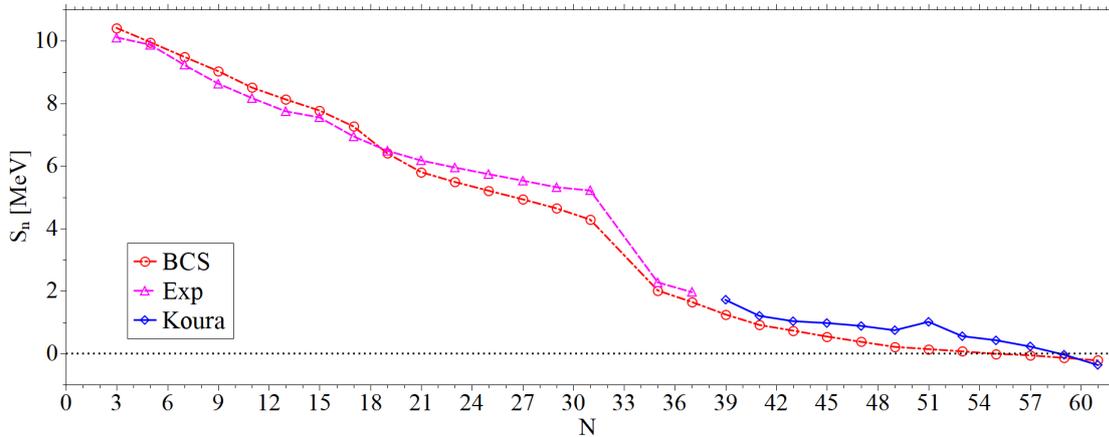


Figura 4.20: Energıa de separacion  $S_n(N)$  calculada numericamente ( $\circ$ ). Los valores experimentales ( $\triangle$ ) se reportan en [41] y los valores teoricos ( $\diamond$ ) se informan en [34].

Si se define la lınea de goteo como el nucleo par para el cual  $S_n$  cambia de signo entre dos isotopos impares, se obtiene con la aproximacion BCS que esto sucede para el  $^{153}\text{Sn}$ . Este resultado esta cerca del valor teorico de  $^{157}\text{Sn}$  reportado por [34].

## Capítulo 5

# Aplicación a la cadena del níquel

El presente capítulo se enfocará en el estudio de la cadena de isótopos del níquel bajo la aproximación BCS en las cercanías de la línea de goteo de neutrones. Se analizará la estructura nuclear y las propiedades de los isótopos del níquel. El níquel  $^{78}\text{Ni}$  es un núcleo doblemente mágico, lo que significa que tiene una estructura especial y un comportamiento dinámico distinto a otros núcleos. Por lo tanto, el estudio detallado de la cadena de isótopos del níquel es importante para comprender mejor la estructura y la dinámica de los núcleos mágicos y para desarrollar una teoría más precisa de la física nuclear.

En este capítulo, se calcularán los gaps de energía, potenciales químicos y cuasienergías de la teoría BCS. Algunos observables como energías de ligadura, probabilidades de ocupación y energías de separación de uno y dos neutrones también serán calculados y comparados con valores experimentales y teóricos.

## 5.1. Representación de partícula simple

$c_0 = 49,424 \text{ MeV}$	$c_1 = 33,413 \text{ MeV}$
$c_0^{SO} = 33,41 \text{ MeV fm}$	$c_1^{SO} = 9,075 \text{ MeV fm}$
$r_0 = 1,27 \text{ fm}$	$a = 0,67 \text{ fm}$

Tabla 5.1: Parámetros del campo medio dependiente de la masa.

En este trabajo se calculan magnitudes para isótopos del níquel del  $^{78}\text{Ni}$  al  $^{86}\text{Ni}$ . Este es un intervalo pequeño de masas debido a que el  $^{78}\text{Ni}$  se encuentra muy próximo a la línea de goteo [4]. Usados los mismos valores de los parámetros  $c_1$  y  $c_1^{SO}$  de la Tabla 4.1, se ajustaron los parámetros  $c_0$  y  $c_0^{SO}$  para construir el campo medio definido por los potenciales Woods-Saxon (3.48) y Spin-Orbit (3.49). La Tabla 5.1 contiene los parámetros que definen los potenciales Woods-Saxon y Spin-Orbit (donde  $I = (Z - N)/A$  es el exceso relativo de neutrones):

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{(r-R)/a}}, \quad V_0 = c_0 + c_1 I$$

$$v_{SO}(r) = -\frac{2}{\hbar^2} \frac{V_{SO}}{ra} \frac{e^{(r-R)/a}}{[1 + e^{(r-R)/a}]^2}, \quad V_{SO} = c_0^{SO} + c_1^{SO} I$$

La Figura 5.1 muestra la evolución de las energías de partícula simple en función del número de valencia  $N$  del núcleo  $^{78}\text{Ni}$ . Estas energías se obtienen solamente a partir de estados de energías ligados; una inclusión de estados del continuo mejorarían los cálculos [43].

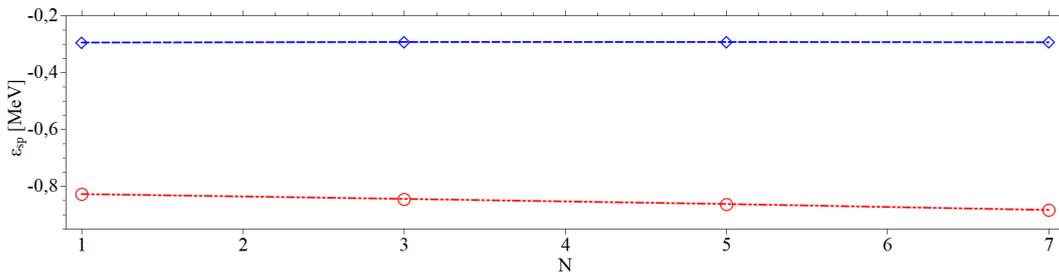


Figura 5.1: Energías de partícula simple  $\varepsilon_a$  en función del número de valencia del  $^{78}\text{Ni}$  para un campo medio dependiente de las masas. Las etiquetas  $\circ$   $d_{5/2}$  y  $\diamond$   $s_{1/2}$  indican los estados de partícula simple.

La dependencia de las energías  $\varepsilon_a$  con la masa es muy pequeña como se puede ver en la Figura 5.1, por lo que tomar un campo medio dependiente o independiente de las masas reproduce los mismos observables [43]. Por este motivo, se decide considerar energías de partícula simple  $\varepsilon_a$  independientes de la masa. Estas energías son mostradas en la Tabla 5.2.

Estado	$\varepsilon_{sp}$ [MeV]
$d_{5/2}$	-0,827
$s_{1/2}$	-0,295

Tabla 5.2: Energías de partícula simple  $\varepsilon$  independientes de la masa calculadas con los parámetros  $c_0 = 40$  MeV,  $c_0^{SO} = 21,43$  MeV,  $c_1 = c_1^{SO} = 0$  MeV,  $r_0 = 1,27$  fm y  $a = 0,67$  fm.

## 5.2. Gap de energía

Los gaps numéricos se comparan con la ecuación experimental de cuarto orden (4.1). Las masas experimentales fueron tomadas de [4]. En los casos donde no son conocidas las masas experimentales, se usaron valores teóricos de [34].

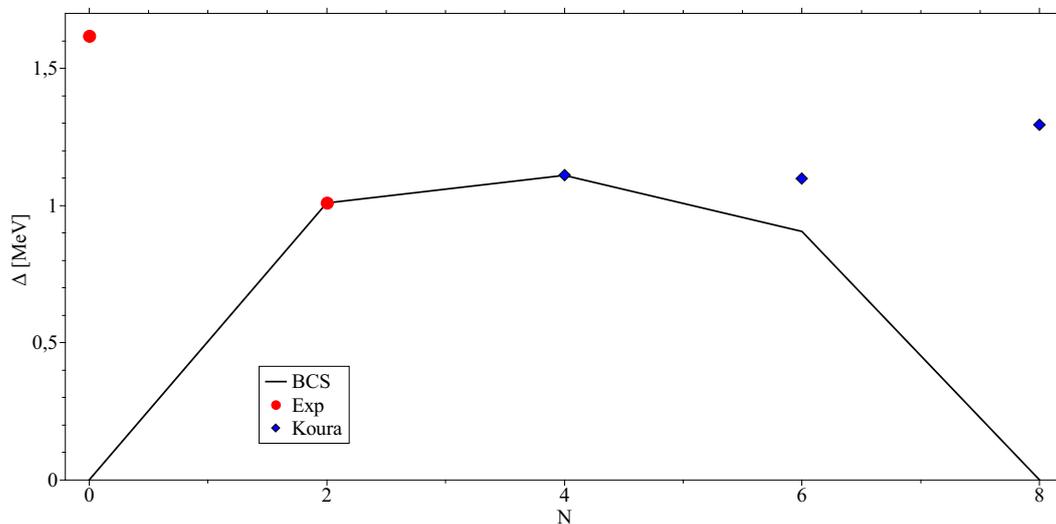


Figura 5.2: Comparación entre los gaps de energía numéricos de la BCS y la ecuación de gap de cuarto orden. Valores (●) experimentales de [4] y valores (◆) teóricos informados por [34].

La Figura 5.2 muestra el gap de energía numérico junto a valores de [4, 34]. El parámetro  $\chi_1$

de (3.47) fue optimizado para reproducir el valor experimental del gap del  $^{80}\text{Ni}$ , lo que resultó en un valor de  $\chi_1 = 43,147$ . La Tabla 5.3 muestra los valores de la intensidad del apareamiento  $G$  para cada isótopo. Se observó que el comportamiento cualitativo de la BCS para el cálculo de los energy gaps resultó ser el mismo para todos los núcleos de referencia en la cadena  $^{80-84}\text{Ni}$ .

Se observa que el comportamiento cualitativo de la BCS no reproduce los datos de [34]. En particular, la BCS siempre predice una superconductividad nula en los núcleos mágicos, por lo que la discrepancia con los datos de los núcleos  $^{78}\text{Ni}$  y  $^{86}\text{Ni}$  es esperable.

### 5.3. Energías efectivas de partícula simple

	$^{80}\text{Ni}$	$^{82}\text{Ni}$	$^{84}\text{Ni}$	$^{86}\text{Ni}$
$G$ [MeV]	0.593	0.572	0.552	0.534

Tabla 5.3: Intensidades  $G$  para los isótopos del níquel del espacio modelo.

Es de interés observar cómo son corregidas las energías de partícula simple de la Tabla 5.2 al incluir, en la aproximación BCS, la información del sistema de muchos cuerpos. Esto se hace considerando las energías efectivas  $e_k$  definidas en la ecuación (4.2),  $e_k(N) = \varepsilon_k(N) - Gv_k^2(N)$ , donde las amplitudes  $G$  son las listadas en la Tabla 5.3. La Figura 5.3 muestra la evolución de las energías  $e_n$  en función del número de valencia  $N$ . Se observa que la interacción de apareamiento constante disminuye los niveles de energía de partícula simple. Por otro lado, el apareamiento tiene una influencia mucho mayor que en los isótopos del estaño.

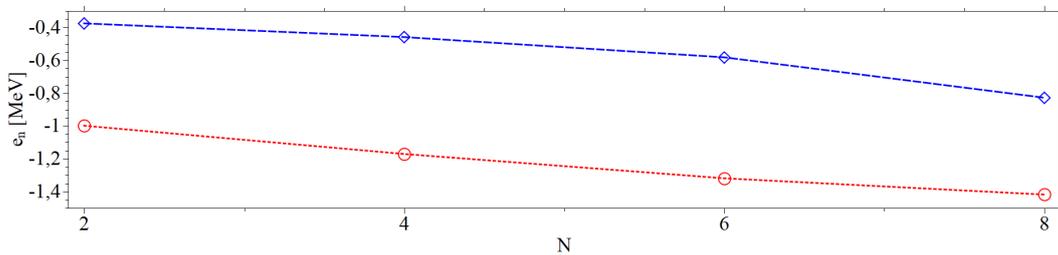


Figura 5.3: Energías efectivas de partícula simple  $e_n(N)$  en función del número de valencia del  $^{78}\text{Ni}$ . Las etiquetas  $\circ$   $d_{5/2}$  y  $\diamond$   $s_{1/2}$  indican los estados.

## 5.4. Nivel de Fermi

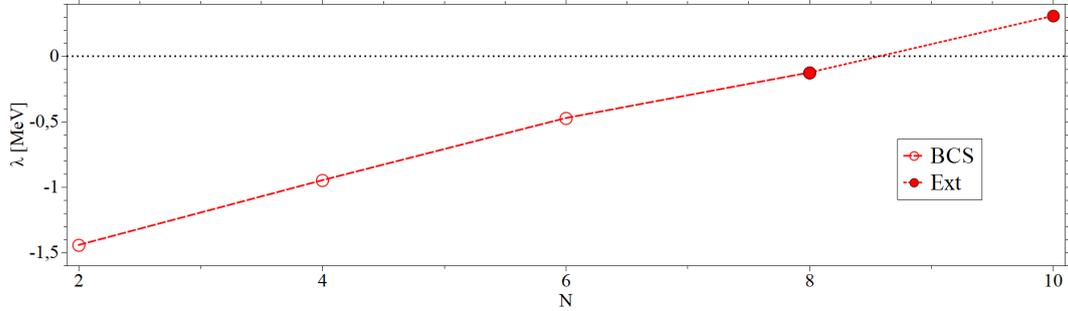


Figura 5.4: Nivel de Fermi para los isótopos del níquel. Los valores extrapolados (●) para  $^{86}\text{Ni}$  y  $^{88}\text{Ni}$  se obtuvieron de extrapolar los tres valores numéricos (○) de la BCS.

La Figura 5.4 muestra el potencial químico  $\lambda = \lambda(N)$  en función del número de valencia del  $^{78}\text{Ni}$  para isótopos pares en la cadena del níquel. Se observa un comportamiento bastante lineal en el potencial químico, con una pendiente positiva como de esperar [44].

Se ve que para todos los isótopos estudiados la energía de Fermi es negativa. Recién ocurre el cambio de signo para el isótopo  $^{88}\text{Ni}$ , como se puede ver en la Figura 5.4, lo que indicaría que la línea de goteo de neutrones ocurre en  $^{86}\text{Ni}$ .

## 5.5. Cuasienergías y probabilidades de ocupación

A continuación se presentan los resultados de las cuasienergías así como las probabilidades de ocupación en el modelo de BCS para la cadena del níquel en la línea de goteo de neutrones. Los cálculos se realizaron considerando el campo medio definido en la Tabla 5.2 y un valor del parámetro  $\chi_1 = 43,147$  en la ecuación (3.47). La Tabla 5.4 contiene las intensidades  $G = G(\Delta)$  en función del gap de energía.

$\Delta$ [MeV]	1,009	1,112	0,913	0,000
$G$ [MeV]	0,593	0,572	0,552	0,534

Tabla 5.4: Intensidad del apareamiento constante para distintos valores de gap de energía. Valores calculados a partir del parámetro de ajuste  $\chi_1 = 43,147$  de la ecuación (3.47).

## Cuasienergías

La Figura 5.5 muestra la evolución de las cuasienergías en la cadena del níquel bajo estudio en función del número de valencia del núcleo  $^{78}\text{Ni}$ . La BCS predice como estado fundamental  $d_{5/2}$  y primer excitado  $s_{1/2}$  para los isótopos  $^{80}\text{Ni}$  y  $^{82}\text{Ni}$ , mientras que el orden reverso para  $^{84}\text{Ni}$  y  $^{86}\text{Ni}$ . Estos resultados concuerdan con los obtenidos por [45, 46]. Estos artículos reportan el mismo orden para el estado fundamental y el primer estado excitado para estos isótopos.

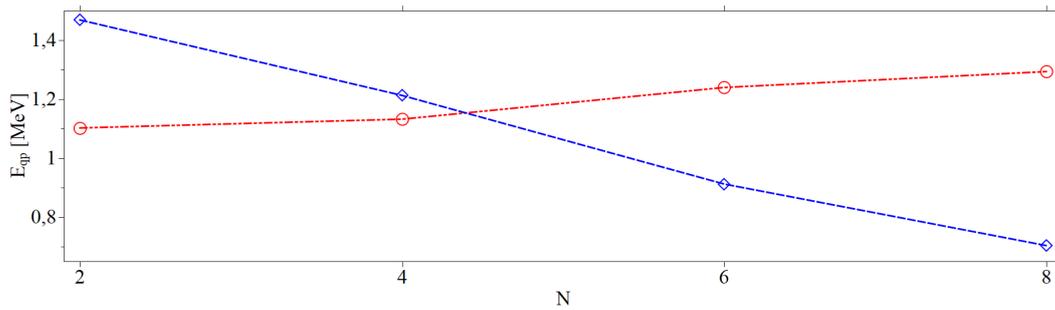


Figura 5.5: Cuasienergías en función del número de valencia de núcleo  $^{78}\text{Ni}$ . Las etiquetas  $\circ$   $d_{5/2}$  y  $\diamond$   $s_{1/2}$  indican los estados de partícula simple.

## Probabilidad de ocupación

La Figura 5.6 muestra la probabilidad de ocupación de los orbitales de partícula simple a medida que aumenta el número de valencia del núcleo  $^{78}\text{Ni}$ . En la cadena de isótopos se puede destacar que resulta que el estado fundamental es  $d_{5/2}$ , seguido por  $s_{1/2}$ , para todos los isótopos estudiados. Es interesante observar que a bajas energías, la probabilidad de ocupación de ambos estados  $d_{5/2}$  y  $s_{1/2}$  para  $^{86}\text{Ni}$  es  $v_\alpha^2 = 1$ . Esto se puede interpretar como un estado de capa llena.<sup>en</sup> el que los orbitales de valencia están completamente ocupados. Esta característica es típica de

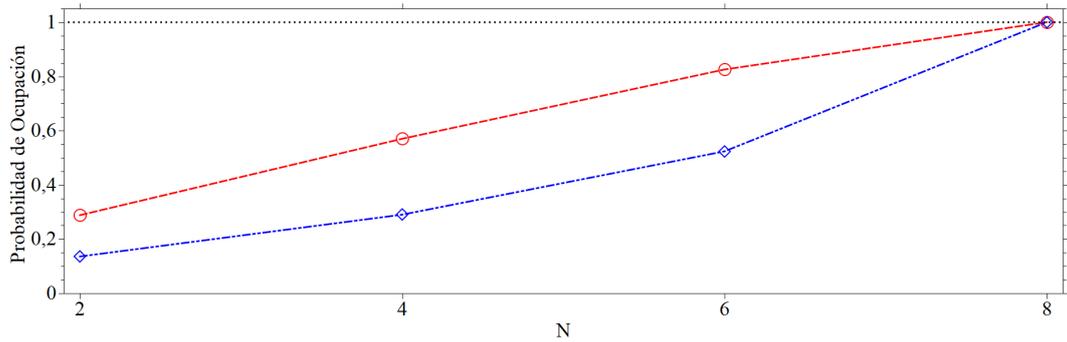


Figura 5.6: Probabilidad de ocupación en función del número de valencia del  $^{78}\text{Ni}$ . Las etiquetas  $\circ$   $d_{5/2}$  y  $\diamond$   $s_{1/2}$  indican los estados de partícula simple.

los núcleos con números mágicos de protones y neutrones, y se debe a la mayor estabilidad de estos núcleos debido a su simetría y estructura interna [15].

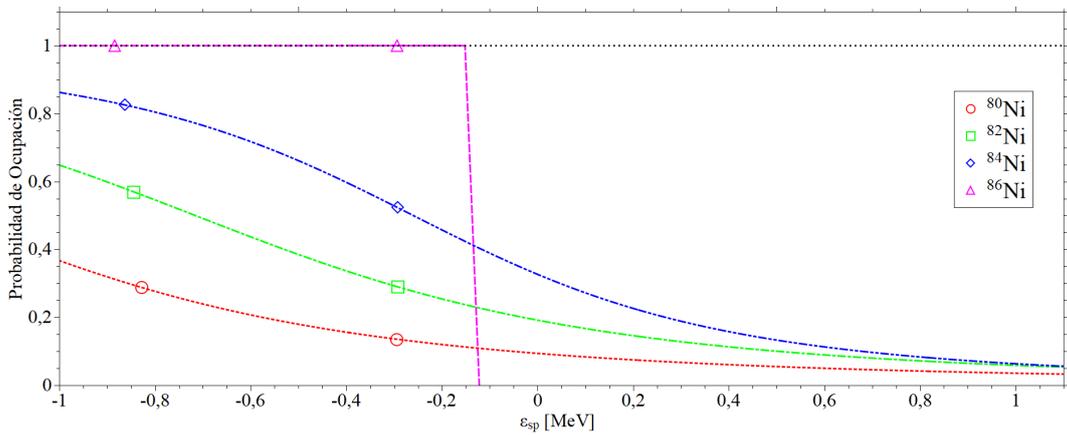


Figura 5.7: Probabilidad de ocupación de algunos núcleos en función de la energía  $\epsilon_a$ .

De manera completamente análoga a la Sección 4.6, la Figura 5.7 muestra la evolución de la probabilidad de ocupación de los isótopos en función de la energía efectiva (4.11). Se observa que una cualidad general es que a medida que aumenta la energía, disminuye la probabilidad de los isótopos de ocupar orbitales. Este comportamiento de la probabilidad de ocupación definida por (4.3) es suave, haciendo que la probabilidad de ocupación tienda a cero a medida que la energía  $e_a$  aumenta. El único núcleo que no comparte este comportamiento suave es  $^{86}\text{Ni}$ , debido a no ser superconductor.

## 5.6. Energía de ligadura y energías de separación de neutrones

Aquí se presentan los resultados de la energía de ligadura y la energía de separación de uno y dos neutrones para isótopos del níquel. Se llevaron a cabo los cálculos de esta sección teniendo en cuenta el campo medio que se encuentra especificado en la Tabla 5.2, junto con un valor determinado del parámetro  $\chi_1$ , que se estableció en 43,147 dentro de la ecuación (3.47). Los valores numéricos obtenidos se comparan con los de [4, 34].

### Energía de ligadura

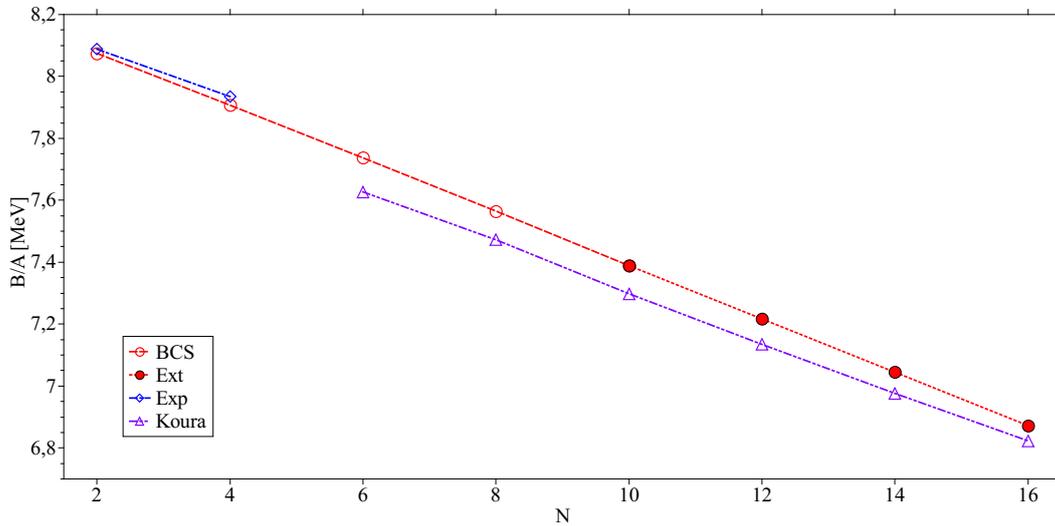


Figura 5.8: Energía de ligadura por partícula de la (○) BCS junto a valores (◇) experimentales reportados en [4] y valores (△) teóricos informados por [34]. Valores extrapolados (●) se obtuvieron a partir de los valores numéricos.

De manera idéntica al caso de la cadena del estaño en la Sección 4.7, la energía por número de nucleón se obtiene como

$$\frac{B}{A} = \frac{B(^{78}\text{Ni}) - E_{BCS}(N)}{N + 78} \quad (5.1)$$

donde el valor experimental  $B(^{78}\text{Ni}) = 642,564$  MeV se obtuvo de [4] para la energía de ligadura del núcleo  $^{78}\text{Ni}$ . La definición de  $E_{BCS}$  se encuentra en la ecuación (4.5). En el caso del níquel

la sumatoria en la definición de  $E_{BCS}$  se debe realizar sobre los estados  $k = d_{5/2}, s_{1/2}$ .

La Figura 5.8 muestra la energía de ligadura por partícula de los isótopos del níquel en función del número de valencia del  $^{78}\text{Ni}$ . El máximo de energía de ligadura sucede en  $N = 2$ , lo cual concuerda con los datos experimentales. A partir de este isótopo, la BCS predice que la energía de ligadura por nucleón decrece prácticamente de manera lineal, lo cual concuerda con [34]. Este comportamiento sigue presente para los valores extrapolados  $N = 10, 12, 14, 16$ .

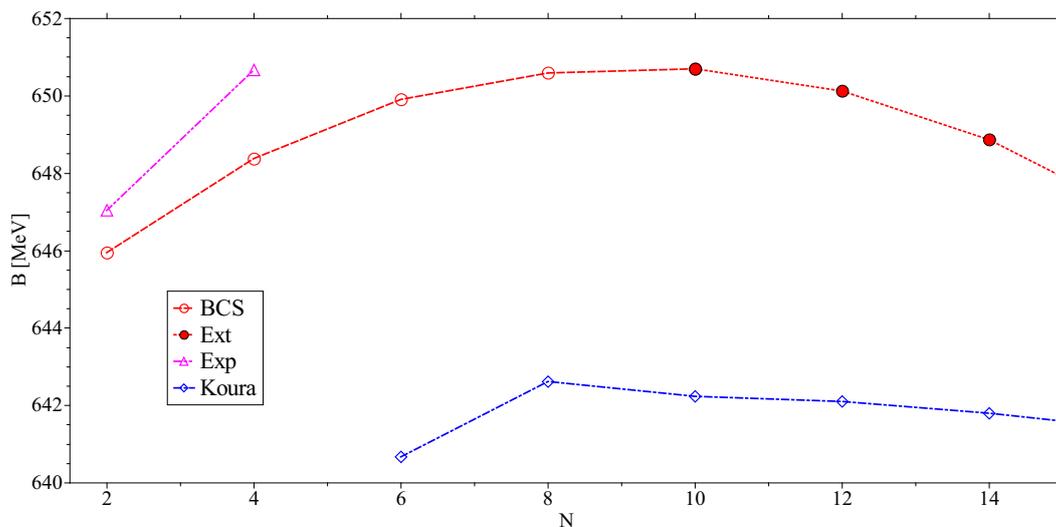


Figura 5.9: Energía de ligadura (○) en la BCS. Valores (●) extrapolados se obtuvieron a partir de los resultados de la BCS. Se incluyeron valores (△) experimentales de [4] así como valores (◇) teóricos de [34].

La Figura 5.9 muestra la energía de ligadura  $B = B(N)$ . La BCS se aparta de los datos experimentales en 1 MeV y 2 MeV para  $^{80}\text{Ni}$  y  $^{82}\text{Ni}$ , respectivamente. Esta discrepancia podría reducirse si se ajustara la intensidad del apareamiento  $G$  con la energía de ligadura en lugar de con el gap de energía. Se observa una discrepancia significativa con los valores teóricos informados por [34]. La BCS predice un cambio en la concavidad de la función  $B = B(N)$  a partir de  $N = 8$ , indicando que se llega a la línea de goteo en el núcleo  $^{86}\text{Ni}$ .

## Energía de separación de dos neutrones

La Figura 5.10 muestra la energía de separación (4.7) de un par de neutrones como función del número de valencia  $N$ . Se incluyeron valores teóricos de [34]. Se aprecia una buena similitud en el comportamiento de los valores teóricos ( $\diamond$ ) y los calculados numéricamente ( $\circ$ ) hasta  $N = 10$ . A partir de este isótopo los valores numéricos de la BCS se apartan de los resultados teóricos.

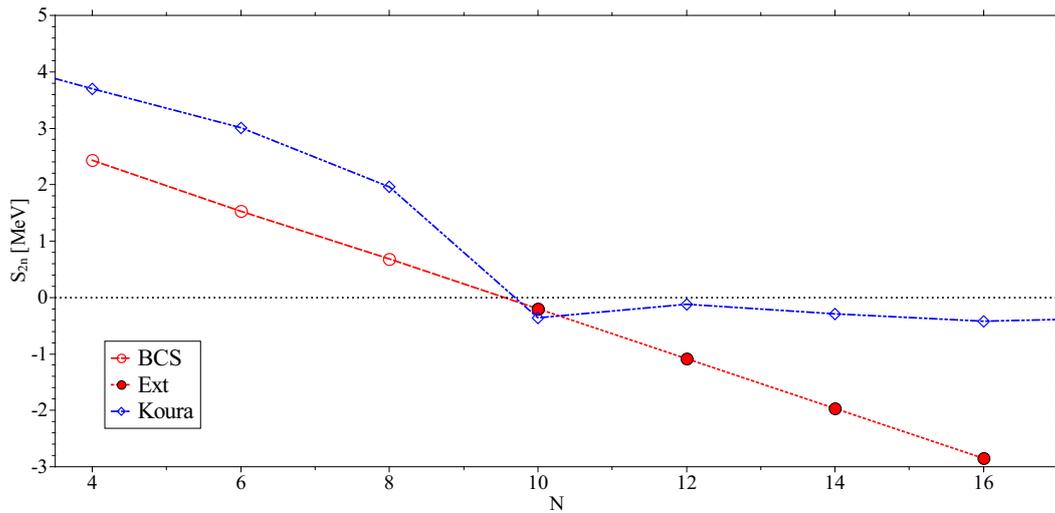


Figura 5.10: Energía de separación de dos neutrones  $S_{2n} = S_{2n}(N)$  en la BCS para la cadena del níquel. Valores ( $\bullet$ ) extrapolados se obtuvieron a partir de los valores ( $\circ$ ) numéricos de la BCS. Los valores ( $\diamond$ ) teóricos se reportan en [34].

Se sabe que la energía de separación de dos neutrones se comporta aproximadamente como  $-2\lambda(N - 1)$  cerca de la línea de goteo [42]. En la aproximación sin bloqueo como es el caso de los cálculos realizados en este trabajo, se toma  $\lambda(N - 1)$  como el nivel de Fermi del núcleo  $N$  par. Luego, la energía de Fermi y la energía de separación de dos neutrones deberían cambiar de signo a partir del mismo núcleo. Este fenómeno es capturado por la aproximación BCS como se puede observar en las Figuras 5.4 y 5.10. La BCS indica entonces que la línea de goteo de dos neutrones se ubica en el isótopo  $^{86}\text{Ni}$ .

## Energía de separación de un neutrón

La Figura 5.11 muestra la energía de separación de un neutrón definida en (4.6) para la cadena del níquel. Al igual que en el caso del níquel, la ecuación (4.6) no es válida para todos los isótopos, y en el caso del níquel no es válida para  $^{79}\text{Ni}$  y  $^{87}\text{Ni}$  [44].

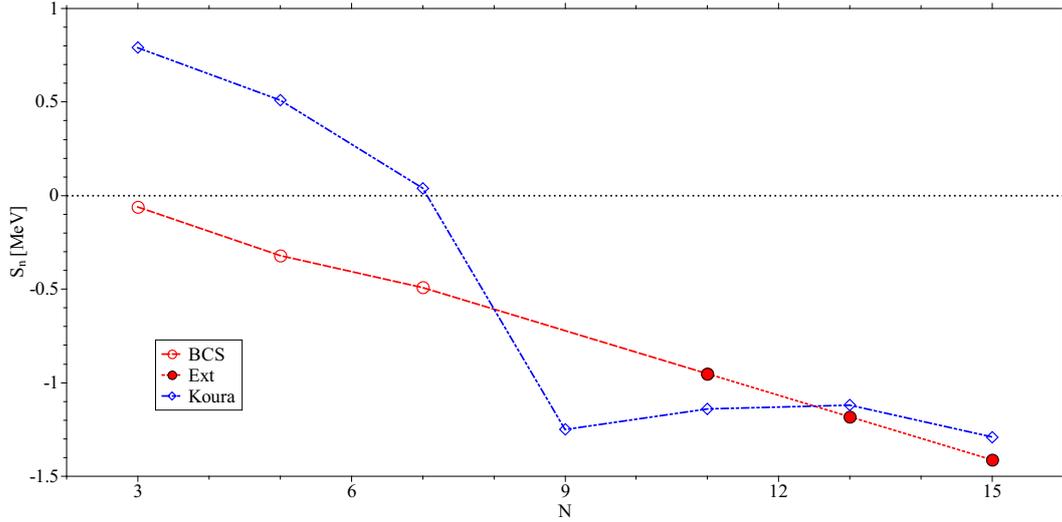


Figura 5.11: Energía de separación de un neutrón  $S_n = S_n(N)$  en la BCS para la cadena del níquel. Valores (●) extrapolados se obtuvieron a partir de los valores (○) numéricos de la BCS. Los valores (◇) teóricos se reportan en [34].

Se observa que la BCS predice siempre una energía  $S_n < 0$  para el rango de isótopos estudiados. Esto implica que la BCS ubica la línea de goteo de un neutrón en  $^{77}\text{Ni}$ . Este resultado difiere del modelo de la Ref. [34] que ubica la línea de goteo de un neutrón en  $^{85}\text{Ni}$ . Por otro lado, cabe recordar que la BCS indica la línea de goteo de dos neutrones en  $^{86}\text{Ni}$ . Esto es un indicador de la importancia del apareamiento en la cercanía de la línea de goteo. Por otro lado, algunos experimentos ponen la línea de goteo de un neutrón en la región  $^{97}\text{Ni}$  -  $^{98}\text{Ni}$ , pero más investigación es necesaria [47]. Es de esperar que la inclusión del espectro continuo de energías modifique la posición de la línea de goteo de un neutrón.

## Capítulo 6

# Formalismo de Gorkov

El formalismo de Gorkov de funciones de Green es una herramienta teórica esencial para describir la estructura y dinámica de los núcleos atómicos. Este formalismo se basa en la función de Green, la cual es una medida de la propagación de partículas en un sistema cuántico. En el formalismo de campos cuánticos, la función de Green se puede expresar en términos de una serie de diagramas de Feynman, que representan interacciones entre partículas del sistema [48]. Esta serie de diagramas es una teoría perturbativa, lo que significa que las soluciones se pueden obtener como una serie de correcciones sucesivas a una solución inicial.

El formalismo de Gorkov de funciones de Green ha sido ampliamente utilizado para estudiar el apareamiento de nucleones en los núcleos atómicos. En particular, el formalismo de Gorkov permite describir los efectos de la interacción de pares nucleares en la estructura y propiedades de los núcleos [49]. Además de su aplicación en la física nuclear, el formalismo de Gorkov también ha sido utilizado en otros campos como la física de condensados de Bose-Einstein, donde se ha utilizado para describir la transición superfluida en sistemas bosónicos ultrafríos [50].

A primer orden, el formalismo de Gorkov de funciones de Green se reduce al formalismo BCS estudiado en el Capítulo 3, que describe la formación de pares de Cooper en un sistema de fermiones sujetos a un apareamiento puro. Este formalismo ha sido utilizado con éxito para

describir la superconductividad nuclear, que es un fenómeno importante en la física de los núcleos atómicos. En resumen, el formalismo de Gorkov de funciones de Green es una herramienta teórica esencial para el estudio de la estructura y dinámica de los núcleos atómicos, y ha sido utilizado con éxito para resolver problemas complejos en la física nuclear.

## 6.1. Representaciones

Como un paso preliminar, se presentan en esta sección tres representaciones importantes (Schrödinger, interacción y Heisenberg) que son útiles para el análisis de la ecuación de Schrödinger en la segunda cuantización.

### Representación de Schrödinger

La descripción elemental de la mecánica cuántica, en la cual se asumen los estados cuánticos dependientes del tiempo, mientras los operadores se toman independientes del tiempo y contruidos a partir de las reglas familiares de correspondencia de las cantidades clásicas asociadas. La ecuación de Schrödinger toma la forma típica

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi\rangle = H |\Psi\rangle \quad (6.1)$$

donde  $H$  se asume explícitamente independiente del tiempo. La solución formal resulta

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iH(t-t_0)/\hbar} |\psi(t_0)\rangle \quad (6.2)$$

donde el operador exponencial se define por su expansión en serie de potencias y, al ser  $H$  hermítico, este representa un operador unitario. Dada la solución a la ecuación de Schrödinger (6.1) en un tiempo  $t_0$ , la transformación unitaria en (6.2) genera la solución para un tiempo  $t$ .

## Representación de interacción

Si se asume un Hamiltoniano independiente del tiempo y se lo descompone en  $H = H_0 + H_I$ , donde  $H_0$  es fácil de resolver, se deben definir los siguientes *estados de interacción* para incluir los efectos de  $H_I$  y resolver  $H$ :

$$|\psi_I(t)\rangle = e^{iH_0 t/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (6.3)$$

Estos satisfacen la ecuación de movimiento correspondiente:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_I(t)\rangle = H_I(t) |\psi_I(t)\rangle \quad , \quad H_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} H_I e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (6.4)$$

Esto motiva definir en la *representación de interacción* los operadores  $O_I$  como

$$O_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} O e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (6.5)$$

De esta manera, esta representación tanto los estados así como los operadores tienen dependencia temporal, aunque en el caso de los operadores esta dependencia es sencilla, a ser,

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_I(t) = e^{iH_0 t/\hbar} (O H_0 - H_0 O) e^{-iH_0 t/\hbar} = [O_I(t), H_0]. \quad (6.6)$$

## Representación de Heisenberg

En esta representación los estados se definen como

$$|\psi_H\rangle = e^{iHt/\hbar} |\psi(t)\rangle \quad (6.7)$$

los cuales resultan independientes del tiempo pues  $i\hbar \partial_t |\psi_H\rangle = 0$ . Un elemento de matriz de un operador genérico se escribe como

$$\langle \psi(t) | O | \psi(t) \rangle = \langle \psi_H | O_H(t) | \psi_H \rangle, \quad O_H(t) \equiv e^{iHt/\hbar} O e^{-iHt/\hbar} \quad (6.8)$$

Se ve entonces que  $O_H(t)$  suele ser un objeto complicado porque  $H$  y  $O$  no conmutan en general, y se ve que en esta representación toda la dependencia temporal la tienen los operadores, no así los estados.

La ecuación de movimiento de cualquier operador es

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} O_H(t) = [O_H(t), H] \quad (6.9)$$

por lo que si  $[O, H] = 0$  se tiene que  $O_H(t)$  es una constante de movimiento. En términos del operador evolución temporal [51]

$$U(t, t_0) = T \left\{ \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' H_I(t') \right] \right\} \quad (6.10)$$

se tiene que

$$O_H(t) = U(0, t) O_I(t) U(t, 0), \quad (6.11)$$

así como los siguiente resultados importantes:

$$|\psi_H\rangle = |\psi_I(0)\rangle = |\psi(0)\rangle, \quad O = O_H(0) = O_I(0). \quad (6.12)$$

Las soluciones estacionarias de la ecuación de Schrödinger tiene energía definida, y sus respectivos autoestados en la representación de Heisenberg satisfacen la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo  $E |\psi_H\rangle = H |\psi_H\rangle$ .

Estos estados entonces son los *autoestados exactos* del sistema y naturalmente son muy complejos para un sistema interactuante. Con el operador  $U$  se pueden obtener los autoestados exactos a partir de autoestados en la representación de interacción:

$$|\psi_H\rangle = |\psi_I(0)\rangle = U(0, t_0) |\psi_I(t_0)\rangle \quad (6.13)$$

## 6.2. Funciones de Green

El formalismo de campos se basa en la técnica de funciones de Green de muchos cuerpos. Con esto en mente, se comienza con la definición usual de la función de Green de una partícula  $G_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t')$  y la función de Green anómala,  $\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t')$  [52]:

$$i\hbar G_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') = \langle \Psi | T c_\alpha(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') | \Psi \rangle \quad (6.14)$$

$$i\hbar \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') = \langle \Psi | T c_\alpha^\dagger(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') | \Psi \rangle \quad (6.15)$$

El operador de ordenamiento temporal en (6.14) y (6.15) se define de la manera usual,

$$T c_\alpha(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') = \theta(t - t') c_\alpha(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') - \theta(t' - t) c_{\alpha'}^\dagger(t') c_\alpha(t) \quad (6.16)$$

donde  $c_\alpha^\dagger(t)$  el operador de creación en la representación de Heisenberg evolucionado por el Hamiltoniano  $\mathcal{H}$  [52]

$$c_\alpha^\dagger(t) = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} c_\alpha^\dagger e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \quad (6.17)$$

Es interesante identificar la evolución temporal de  $c_\alpha(t)$  para la derivación que se llevará a cabo en la siguiente sección. Esta es siguiendo (6.9),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_\alpha(t) = [c_\alpha(t), \mathcal{H}] = e^{i\mathcal{H}t/\hbar} [c_\alpha, \mathcal{H}] e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} \quad (6.18)$$

En términos de los conmutadores

$$[c_\alpha, \mathcal{H}_0] = e_\alpha c_\alpha(t), \quad [c_\alpha, \mathbf{V}] = \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma, \quad (6.19)$$

(6.18) resulta

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} c_\alpha(t) = e_\alpha c_\alpha(t) + \frac{1}{2} \sum_{\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_\beta^\dagger(t) c_\delta(t) c_\gamma(t) \quad (6.20)$$

### 6.3. Ecuaciones de Gorkov

En esta sección se derivarán las ecuaciones de movimiento para  $G_{\alpha\alpha'}(t, t')$  y  $\tilde{G}_{\alpha\alpha'}(t, t')$  para el sistema de partículas dado por (donde  $\varepsilon_a$  la energía de partícula simple del campo medio,  $e_a = \varepsilon_a - \lambda$  y  $\alpha = \{a, m_\alpha\} = \{n_a, l_a, j_a, m_\alpha\}$ )

$$\mathcal{H} = H_0 + V - \lambda N = \mathcal{H}_0 + V = \sum_{\alpha} e_a c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \quad (6.21)$$

para una interacción de apareamiento puro separable  $\langle a b; J | V | c d; J \rangle$  de la forma (2.31). Reescribir estos elementos matriciales en función de los matriciales antisimetrizados  $\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}$  resulta en

$$\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} = g_{ac} \delta_{\alpha\bar{\beta}} \delta_{\gamma\bar{\delta}}, \quad \delta_{\alpha\bar{\beta}} \equiv (-1)^{j_a - m_\alpha} \delta_{ab} \delta_{m_\alpha, -m_\beta} \quad (6.22)$$

con  $m_\alpha, m_\gamma > 0$  y donde  $g_{ac} = -g f_a f_c$ , con  $g > 0$  [53].

Usando de manera explícita el ordenamiento temporal (6.16) y tomando la derivada temporal de (6.14) y (6.15), y las ecuaciones (6.19) y (6.20), se obtiene las siguientes ecuaciones acopladas para  $G$  y  $\tilde{G}$ :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \delta(t - t') \delta_{\alpha\alpha'} + \varepsilon_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') + \sum_{\beta, \gamma, \delta} \frac{\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}}{2i\hbar} \langle \Psi | T [c_{\beta}^{\dagger}(t) c_{\delta}(t) c_{\gamma}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t')] | \Psi \rangle \quad (6.23)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^{\dagger}(t, t') = -\varepsilon_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^{\dagger}(t, t') - \sum_{\beta, \gamma, \delta} \frac{\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}}{2i\hbar} \langle \Psi | T [c_{\gamma}^{\dagger}(t) c_{\delta}^{\dagger}(t) c_{\beta}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t')] | \Psi \rangle \quad (6.24)$$

A continuación, se evalúan estas ecuaciones para la interacción separable (6.22):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \delta(t - t') \delta_{\alpha\alpha'} + \varepsilon_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') - \frac{g f_a}{i\hbar} \sum_{\gamma > 0} f_c \langle \Psi | T [c_{\bar{\alpha}}^{\dagger}(t) c_{\bar{\gamma}}(t) c_{\gamma}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t')] | \Psi \rangle \quad (6.25)$$

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^{\dagger}(t, t') = -\varepsilon_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^{\dagger}(t, t') + \frac{g f_a}{i\hbar} \sum_{\gamma > 0} f_c \langle \Psi | T [c_{\gamma}^{\dagger}(t) c_{\bar{\gamma}}^{\dagger}(t) c_{\bar{\alpha}}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t')] | \Psi \rangle \quad (6.26)$$

En la aproximación de campo medio [51], las ecuaciones anteriores se puede reescribir completamente en términos de  $G$  y  $\tilde{G}$  (ver Apéndice B)

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} - \tilde{e}_a\right)G_{\alpha\alpha'}(\tau) + i\hbar g f_a \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\tilde{\gamma}\gamma}(0) \tilde{G}_{\tilde{\alpha}\alpha'}^\dagger(\tau) = \delta(\tau)\delta_{\alpha\alpha'} \quad (6.27)$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \tilde{e}_a\right)\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(\tau) - i\hbar g f_a \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\tilde{\gamma}\gamma}(0) G_{\tilde{\alpha}\alpha'}^\dagger(\tau) = 0 \quad (6.28)$$

donde  $m_\alpha > 0$ ,  $\tau = t - t'$  y  $\tilde{e}_a = \varepsilon_a - g f_a^2 n_a$ , la energía modificada de partícula simple, con  $n_a = -i\hbar G_{\alpha\alpha'}(0)$  la probabilidad de ocupación del estado  $\alpha$  [51].

Las ecuaciones (6.27) y (6.28) constituyen la versión final de las ecuaciones de movimiento de Gorkov en la representación dependiente del tiempo. En la siguiente sección se resolverán mediante la técnica de la transformada de Fourier.

## 6.4. Soluciones algebraicas de las ecuaciones de movimiento

En primer instancia, se introducen los parámetros de gap dependientes del estado  $\Delta_a$  (ver Apéndice C),

$$\Delta_a = -i f_a g \hbar \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\tilde{\gamma}\gamma}(0) \quad (6.29)$$

y, usando las relaciones  $\left(\tilde{G}_{\tilde{\gamma}\gamma}(0)\right)^* = \tilde{G}_{\tilde{\gamma}\gamma}^\dagger(0) = -\tilde{G}_{\gamma\tilde{\gamma}}^\dagger(0)$ , sus complejos conjugados

$$\Delta_a^* = -i f_a g \hbar \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\gamma\tilde{\gamma}}(0) \quad (6.30)$$

Con las definiciones anteriores, las ecuaciones (6.27) y (6.28) toman la forma:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} - \tilde{e}_a\right)G_{\alpha\alpha'}(\tau) - \Delta_a \tilde{G}_{\tilde{\alpha}\alpha'}^\dagger(\tau) = \delta(\tau)\delta_{\alpha\alpha'} \quad (6.31)$$

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial\tau} + \tilde{e}_a\right)\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(\tau) + \Delta_a^* G_{\tilde{\alpha}\alpha'}^\dagger(\tau) = 0 \quad (6.32)$$

A continuación, se realiza una transformada de Fourier a representación en energía

$$G_{\alpha\alpha'}(\tau) = \frac{1}{2\pi\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} G_{\alpha\alpha'}(E) e^{-iE\tau/\hbar} dE \quad (6.33)$$

de las ecuaciones de movimiento (6.27) y (6.28) y se obtiene,

$$(E - \tilde{e}_a)G_{\alpha\alpha'}(E) - \Delta_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(E) = \delta_{\bar{\alpha}\alpha'} \quad (6.34)$$

$$(E + \tilde{e}_a)G_{\alpha\alpha'}^\dagger(E) + \Delta_a^* \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(E) = 0 \quad (6.35)$$

donde se usó  $2\pi\hbar\delta(\tau) = \int e^{-iE\tau/\hbar} dE$ .

Ya que  $G_{\bar{\alpha}\alpha'} = \delta_{\bar{\alpha}\alpha'} G_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}}(E)$ , (6.35) da  $\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(E) = 0$  para  $\bar{\alpha} \neq \alpha'$ , lo que muestra que los únicos elementos matriciales no nulos de  $\tilde{G}^\dagger$  son estados acompañantes inverso-temporales, así

$$\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(E) = \delta_{\bar{\alpha}\alpha'} \tilde{G}_{\alpha\bar{\alpha}}^\dagger(E) \quad (6.36)$$

Ecuación (6.34) da, para  $\alpha \neq \alpha'$ ,  $\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(E) = 0$ , mostrando que los únicos elementos matriciales no nulos de  $\tilde{G}^\dagger$  son estados acompañantes inverso-temporales. Así  $\tilde{G}_{\bar{\alpha}\alpha'}^\dagger(E) = \delta_{\alpha\alpha'} \tilde{G}_{\bar{\alpha}\alpha}^\dagger(E)$ , lo cual es como (6.36) pero con la sustitución  $\bar{\alpha} \leftrightarrow \alpha$ .

Usando la identidad anterior se llega para las ecuaciones de movimiento que

$$(E - \tilde{e}_a)G_{\alpha\alpha}(E) + \Delta_a \tilde{G}_{\alpha\bar{\alpha}}^\dagger(E) = 1 \quad (6.37)$$

$$(E + \tilde{e}_A) \tilde{G}_{\alpha\bar{\alpha}}^\dagger(E) + \Delta_a^* G_{\alpha\alpha}(E) = 0 \quad (6.38)$$

donde se ha usado  $\tilde{G}_{\bar{\alpha}\alpha}^\dagger(E) = -\tilde{G}_{\alpha\bar{\alpha}}^\dagger(E)$  y  $G_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}} = G_{\alpha\alpha}(E)$ . Este par de ecuaciones algebraicas acopladas para  $G_{\alpha\alpha}(E)$  y  $\tilde{G}_{\alpha\bar{\alpha}}^\dagger(E)$  con  $m_\alpha > 0$  tiene por solución

$$G_{\alpha\alpha}(E) = \frac{E + \tilde{e}_a}{E^2 - E_a^2} \quad (6.39)$$

$$\tilde{G}_{\alpha\bar{\alpha}}^\dagger(E) = -\frac{\Delta_a^*}{E^2 - E_a^2} \quad (6.40)$$

donde se ha introducida la energía desplazada de cuasipartícula

$$E_a^2 = \tilde{\epsilon}_a^2 + |\Delta_a|^2 \quad (6.41)$$

Mediante una descomposición parcial en fracciones de (6.39),

$$G_{\alpha\alpha}(E) = \frac{A_a}{E - E_a} + \frac{B_a}{E + E_a} \quad (6.42)$$

se tiene

$$A_a = \frac{E_a + \tilde{\epsilon}_a}{2E_a}, \quad B_a = \frac{E_a - \tilde{\epsilon}_a}{2E_a}, \quad A_a + B_a = 1 \quad (6.43)$$

A este punto se puede reconocer la probabilidad de ocupación de la BCS

$$B_a = \frac{E_a - \tilde{\epsilon}_a}{2E_a} = \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{\tilde{\epsilon}_a}{E_a} \right) = v_a^2, \quad (6.44)$$

y de la condición  $A_a + B_a = 1$  que  $A_a = u_a^2$ , luego

$$G_{\alpha\alpha}(E) = \frac{u_a^2}{E - E_a} + \frac{v_a^2}{E + E_a} \quad (6.45)$$

De la expresión anterior se ve que la función de Green tiene un polo en  $E = E_a$  y  $E = -E_a$ , donde se adoptó la convención  $E_a > 0$ . Con el fin de realizar la transformada de Fourier inversa, se tiene que saber cómo evitar estas singularidades en el eje real  $E$  donde yacen los polos. Para ello se procede a extender la variable  $E$  al plano complejo

$$E \rightarrow E + i|\eta| \text{sgn}(\eta), \quad (6.46)$$

donde  $\eta$  es un infinitesimal y el signo está determinado por la prescripción de Landau [54]

$$\frac{\mathcal{F}[G(E)]}{E} < 0 \quad (6.47)$$

Usando la identidad  $(x - x_0 + i0)^{-1} = P \frac{1}{x-x_0} - i\pi\delta(x - x_0)$  se obtiene,

$$\frac{\mathcal{F}[G(E)]}{E} = -\pi \frac{\text{sgn}(\eta)}{E} \left[ e_a^2 \delta(E - E_a) + v_a^2 \delta(E + E_a) \right] \Rightarrow \text{sgn}(\eta) = \text{sgn}(E) \quad (6.48)$$

De esta manera, la función de Green resulta

$$G_{\alpha\alpha}(E) = \frac{u_a^2}{E + i|\eta|\text{sgn}(E) - E_a} + \frac{v_a^2}{E + i|\eta|\text{sgn}(E) + E_a} \quad (6.49)$$

Debido al hecho que  $E_a > 0$ , la función de Green tiene un polo en  $E = E_a - i|\eta|\text{sgn}(E) = E_a - i|\eta|$  con un residuo de  $u_a^2$  y un segundo polo en  $E = -E_a - i|\eta|\text{sgn}(E) = -E_a + i|\eta|$  con un residuo de  $v_a^2$ . Este resultado permite escribir la función de Green en una forma más práctica,

$$G_{\alpha\alpha}(E) = \frac{u_a^2}{E - (E_a - i\eta)} + \frac{v_a^2}{E - (-E_a + i\eta)}, \quad \eta > 0 \quad (6.50)$$

Por su lado, la función de Green anómala resulta,

$$\tilde{G}_{\alpha\alpha}^\dagger(E) = -\frac{\Delta_a^*}{[E - (E_a - i\eta)][E - (-E_a + i\eta)]} \quad (6.51)$$

lo cual muestra que  $\tilde{G}_{\alpha\alpha}^\dagger(E)$  tiene un polo en  $E = E_a - i\eta$  con residuo  $\Delta_a^*/(2E_a)$  y otro polo en  $E = -E_a + i\eta$ , con residuo  $\Delta_a^*/(2E_a)$ , donde ya se ha tomado el límite  $\eta \rightarrow 0$ . Las ecuaciones (6.50) y (6.51) resuelven completamente las ecuaciones algebraicas de movimiento (6.37) y (6.38).

## 6.5. Observables

En esta última sección se recuperarán las ecuaciones BCS (3.42) del Capítulo 3 para un número dado de partículas e interacción de apareamiento puro. Para esto se apelará a los resultados de las Secciones Secciones 6.3 y 6.4 tomando los parámetros  $f_a = f_c = 1$ .

## Número de partículas

Como se discutió al principio del Capítulo 3, en sistemas de partículas donde el estado fundamental  $|\Psi\rangle$  no conserva el número de partícula, lo que sí se debe conservar en promedio el correcto número de partículas  $N$ , es decir,  $\langle\Psi|N|\Psi\rangle = N$ , luego

$$N = \sum_{\alpha} n_{\alpha} = -i\hbar \sum_{\alpha} G_{\alpha\alpha}(\tau = 0^-) = -i\hbar \sum_{\alpha} \lim_{\tau \rightarrow 0^-} G_{\alpha\alpha}(\tau) \quad (6.52)$$

Integrando  $G_{\alpha\alpha}(\tau)$  en un contorno cerrado en el semiplano superior de energía compleja da

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^-} G_{\alpha\alpha}(\tau) = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \int \left[ \frac{u_a^2}{E - (E_a - i|\eta|)} + \frac{v_a^2}{E - (-E_a + i|\eta|)} \right] e^{-iE\tau/\hbar} \frac{dE}{2\pi\hbar} = \frac{i}{\hbar} v_a^2 \quad (6.53)$$

con lo que  $n_{\alpha} = v_a^2$  es la probabilidad de ocupación en el formalismo de funciones de Green. Reemplazando (6.53) en (6.52) se tiene para el promedio del número de partículas

$$N = \sum_{\alpha} v_a^2 = \frac{1}{2} \sum_a (2j_a + 1) v_a^2 \quad (6.54)$$

que es el mismo resultado que en la BCS.

## Ecuación del gap

Tomando  $f_a = f_c = 1$  y en la ecuación (6.29) se tiene

$$\Delta_a^* = \Delta^* = \frac{g\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} \tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^{\dagger}(\tau = 0) \quad (6.55)$$

En la ecuación (6.29) se muestra que el límite  $\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^{\dagger}(0)$  es independiente de cómo se realiza.

En el Apéndice C se calcula que tiene un valor de  $\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0) = \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta^*}{2E_c}$  por lo que

$$\Delta^* = \frac{g\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta^*}{2E_c} = g \sum_{\gamma>0} \frac{\Delta^*}{2E_c} \quad (6.56)$$

Renombrando  $g \rightarrow G$ ,  $\gamma \rightarrow \alpha$ , conjugando ambos términos y sustituyendo (3.35) se tiene que

$$\Delta = G \sum_{\alpha>0} \frac{\Delta}{2E_a} = G \sum_{\alpha>0} u_a v_a = \frac{G}{2} \sum_a (2j_a + 1) u_a v_a \quad (6.57)$$

que no es más que la ecuación de gap de la BCS del Capítulo 3.

## Cuasienergías

Junto a las expresiones para  $N$  y  $\Delta$  discutidas en los párrafos anteriores se obtiene de manera directa que las cuasienergías (6.41) se reducen a las usuales  $E_a$  de (3.42). Para esto basta desarrollar (6.41)

$$E_a^2 = (\varepsilon_a - \lambda - g f_a^2 n_\alpha)^2 + |\Delta_a|^2 \quad (6.58)$$

Reemplazando  $f_a = 1$  y usando (6.54) y (6.55) se tiene que

$$E_a^2 = (\varepsilon_a - \lambda - g v_a^2)^2 + |\Delta|^2 = e_a^2 + |\Delta|^2 \quad (6.59)$$

donde las energías corregidas  $e_a = \varepsilon_a - \lambda - G v_a^2$  son las definidas en (3.25). La ecuación (6.59) es exactamente la misma cuasienergía que predice la BCS.

## Capítulo 7

# Conclusiones y proyecciones

La tesis de grado realizada concluye que la teoría BCS, junto con el Modelo de Capas y la representación de cuasipartículas, puede ser una herramienta valiosa para predecir y explicar diversos observables en núcleos atómicos. Se ha encontrado que la teoría BCS es efectiva para isótopos del estaño y del níquel en la línea de goteo de neutrones, prediciendo con precisión varios observables. Sin embargo, la BCS no funciona en todos los casos, lo que sugiere limitaciones en su aplicabilidad.

Es importante destacar que la BCS es una teoría no perturbativa, lo que es una desventaja respecto a otros marcos teóricos, como el formalismo de Gorkov de funciones de Green. No obstante, se sugiere mejorar la BCS incluyendo estados del espectro continuo de energías. Esta mejora permitiría expandir la aplicabilidad de la teoría BCS a una mayor variedad de sistemas nucleares y mejorar su capacidad predictiva.

El estudio de las correlaciones de apareamiento y la teoría BCS en sistemas nucleares sigue siendo un tema de investigación en curso: “Even today there is no consistent theory of pairing in nuclei available” (Schmidt 2010) [55]. En la actualidad existen una serie de temas en física nuclear que, con el avance de las técnicas experimentales, proporcionan nuevos datos que exigen una interpretación teórica y nuevas predicciones basadas en modelos. Este es el caso de la búsqueda

de nuevos elementos, mediante la exploración de regiones alejadas del valle de estabilidad; se piensa que en dichas zonas la existencia de nuevos núcleos se conseguiría, sobre todo, por medio de las correlaciones de apareamiento. Otro tema sobre el que se trabaja es la formación de núcleos con halo, donde también las correlaciones de apareamiento jugarían un papel muy importante [56]. Asimismo, el apareamiento también deben de ser muy influyentes en reacciones nucleares de fisión y de fusión.

El alcance de los cálculos de estructura nuclear *ab initio* se ha ampliado enormemente desde principios del siglo XXI. Métodos como el acoplamiento de clústeres (CC) [57], el grupo de renormalización de similitud en medio (IMSRG) [58] o la función de Green autoconsistente de Dyson [59] sin embargo están limitados a (sub)capas doblemente cerradas y sus vecinos inmediatos [60].

Una forma de abordar núcleos verdaderamente de capa abierta puede implicar el desarrollo de un esquema multirreferencial, como por ejemplo el esquema multi-referencial CC [61]. Alternativamente, se puede construir el estado correlacionado de muchos cuerpos a partir de un estado de referencia que ya incorpore correlaciones de apareamiento de orden cero, como en el caso de la teoría de Bogoliubov. En este último grupo se encuentra el formalismo de Gorkov de funciones de Green. Este método incorpora explícitamente las correlaciones de apareamiento a través de la introducción de propagadores anómalos, tratados en igualdad de condiciones que (y acoplados a) los propagadores normales de la teoría de Dyson.

Los resultados confirman que este enfoque es computacionalmente viable [49]. Por lo tanto, el método es aplicable a varias cadenas isotópicas de interés - como O, Ca, Ni,  $N = 20$  y  $N = 28$  - que incluyen varios isótopos que previamente no eran accesibles mediante enfoques *ab initio*. Otro beneficio específico es proporcionar eventualmente una forma de comprender microscópicamente y cuantitativamente los procesos responsables del carácter superfluido de los núcleos atómicos [62]. Trabajos en esta dirección están en progreso para abrir un camino que aumente enormemente el alcance de las teorías *ab initio* en la región de masas intermedias.

# Apéndice

## A. Representación del Hamiltoniano nuclear en cuasipartículas

Con las contracciones para los operadores de cuasipartículas y las leyes de transformación (3.7) y (3.9), se pueden obtener las contracciones para los operadores de creación y destrucción de partículas respecto al vacío  $|\text{BCS}\rangle$ , que resultan

$$\overline{c_\alpha c_\beta^\dagger} = u_a^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad \overline{c_\alpha^\dagger c_\beta} = v_a^2 \delta_{\alpha\beta}, \quad (\text{A.1})$$

$$\overline{c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger} = u_a v_a (-1)^{j_a - m_\alpha} \delta_{\alpha, -\beta}, \quad (\text{A.2})$$

$$\overline{c_\alpha c_\beta} = u_a v_a (-1)^{j_a + m_\alpha} \delta_{\alpha, -\beta}. \quad (\text{A.3})$$

### Teorema de Wick

A continuación, se combinarán contracciones con un producto de operadores bajo el ordenamiento normal introducido en (2.13). Una productoria con contracciones ordenada normalmente tiene la forma

$$\mathcal{N}[\overbrace{ABCDE \cdots XYZ}] = (-1)^P \overline{B} \overline{E} \overline{D} \overline{Y} \mathcal{N}[AC \cdots XZ] \quad (\text{A.4})$$

donde  $P$  aquel número de transposiciones de operadores que toma todas las parejas contraídas a la izquierda del producto del operador de orden  $\mathcal{N}$ . Con estos conceptos, el teorema de Wick establece [63]:

$$\begin{aligned}
& ABCDEF \dots = \mathcal{N}[ABCDEF \dots] \\
& \quad + \mathcal{N}[\overline{ABCDEF} \dots] + \mathcal{N}[\overline{ABCDEF} \dots] + \text{el resto de 1-contracciones} \\
& \quad + \mathcal{N}[\overline{ABCDEF} \dots] + \text{el resto de 2-contracciones} \\
& \quad + \dots \\
& \quad + \text{todos los términos normalmente ordenados con } n\text{-contracciones} \\
& \quad + \dots \\
& \quad + \text{todos los términos con todas las parejas contraídas}
\end{aligned} \tag{A.5}$$

El teorema de Wick es válido para cualquier vacío  $|\psi_0\rangle$  mientras que el orden normal sea respecto a tal vacío. Debido a que en el vacío todos los valores esperados de los términos ordenados de manera normal son nulos, (A.5) se reduce a

$$\begin{aligned}
\langle \psi_0 | ABCDEF \dots | \psi_0 \rangle = & \sum_{\substack{\text{todas las contracciones} \\ \text{combinadas}}} (-1)^{\substack{n^\circ \text{ de cruces de líneas} \\ \text{de contracción}}} \\
& \times \text{producto con todas las parejas contraídas}
\end{aligned} \tag{A.6}$$

Esta última fórmula significa que se deben formar todos los productos completamente contraídos posibles y sumarlos con factores de fase adecuados. El factor de fase es +1 si el número de intersecciones de líneas de contracción es par y -1 si es impar [8].

En la Sección 2.4 se logró descomponer el Hamiltoniano en el campo medio de Hartree-Fock y una interacción residual, como se muestra en (2.21). Ahora, se propone hacer lo mismo pero en la representación de cuasipartículas, es decir, escribir el Hamiltoniano como la suma de un término de cuasipartícula simple, que describe el campo medio de cuasipartículas, y una interacción residual.

Para el término de interacción, el teorema de Wick (A.6) da

$$\begin{aligned}
4V &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{N} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \right] + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} | \text{BCS} \rangle \mathcal{N} \left[ c_{\delta} c_{\gamma} \right] \\
&- \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} | \text{BCS} \rangle \mathcal{N} \left[ c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} \right] + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} | \text{BCS} \rangle \mathcal{N} \left[ c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} \right] \\
&+ \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} | \text{BCS} \rangle \mathcal{N} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} \right] - \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} | \text{BCS} \rangle \mathcal{N} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} \right] \\
&+ \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\delta} c_{\gamma} | \text{BCS} \rangle \mathcal{N} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} \right] + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} | \text{BCS} \rangle \langle \text{BCS} | c_{\delta} c_{\gamma} | \text{BCS} \rangle \\
&- \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\delta} | \text{BCS} \rangle \langle \text{BCS} | c_{\beta}^{\dagger} c_{\gamma} | \text{BCS} \rangle + \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \text{BCS} | c_{\alpha}^{\dagger} c_{\gamma} | \text{BCS} \rangle \langle \text{BCS} | c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} | \text{BCS} \rangle
\end{aligned} \tag{A.7}$$

Haciendo uso de (3.7), (3.9), (A.1)-(A.3), las propiedades de simetría

$$\begin{aligned}
\bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} &= -\bar{v}_{\beta\alpha\gamma\delta} = -\bar{v}_{\alpha\beta\delta\gamma} = \bar{v}_{\beta\alpha\delta\gamma} = \bar{v}_{\gamma\delta\alpha\beta}^*, \\
\bar{v}_{-\alpha, -\beta, -\gamma, -\delta} &= (-1)^{j_a - m_{\alpha} + j_b - m_{\beta} + j_c - m_{\gamma} + j_d - m_{\delta}} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta}
\end{aligned}$$

y un directo pero tedioso desarrollo algebraico se obtiene [8]

$$\begin{aligned}
4V &= \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{N} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \right] + 2 \sum_{\alpha\beta} \bar{v}_{\alpha\beta\alpha\beta} v_a^2 v_b^2 \\
&+ \sum_{\alpha\beta} \bar{v}_{\alpha, -\alpha\beta, -\beta} (-1)^{j_a - m_{\alpha} + j_b - m_{\beta}} u_a v_a u_b v_b \\
&+ 2 \sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha, -\alpha, -\gamma\delta} (-1)^{j_a - m_{\alpha} + j_c - m_{\gamma}} u_a v_a (u_d v_c + v_d u_c) a_{\gamma}^{\dagger} a_{\delta} \\
&+ 4 \sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\gamma\alpha\delta} v_a^2 (u_c u_d - v_d v_c) a_{\gamma}^{\dagger} a_{\delta} + 4 \sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\delta\alpha, -\gamma} (-1)^{j_c - m_{\gamma}} v_a^2 u_d v_c (a_{\gamma}^{\dagger} a_{\delta}^{\dagger} + a_{\delta} a_{\gamma}) \\
&+ \sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha, -\alpha\gamma\delta} (-1)^{j_a + m_{\alpha}} u_a v_a (v_c v_d - u_c u_d) (a_{\gamma}^{\dagger} a_{\delta}^{\dagger} + a_{\delta} a_{\gamma})
\end{aligned} \tag{A.8}$$

Apelando a los resultados de la Sección 2.4.2, a propiedades de los símbolos de Clebsh-Gordan [8] y al modelo de emparejamiento puro (2.31)  $\langle a b; J | V | c d; J \rangle = -\frac{1}{2} G \delta_{J0} \delta_{ab} \delta_{cd} \hat{J}_a \hat{J}_c$  se pueden escribir los términos de (A.8) de manera explícita

$$\sum_{\alpha\beta} \bar{v}_{\alpha\beta\alpha\beta} v_a^2 v_b^2 = -G \sum_a v_a^4 \hat{j}_a^2 \quad (\text{A.9})$$

$$\sum_{\alpha\beta} \bar{v}_{\alpha,-\alpha\beta,-\beta} (-1)^{j_a - m_\alpha + j_b - m_\beta} u_a v_a u_b v_b = -G \sum_{ab} u_a v_a u_b v_b \hat{j}_a^2 \hat{j}_b^2 \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha,-\alpha,-\gamma\delta} (-1)^{j_a - m_\alpha + j_c - m_\gamma} u_a v_a (u_d v_c + v_d u_c) a_\gamma^\dagger a_\delta = \\ - 2G \sum_{ac} u_a v_a u_c v_c \hat{j}_a^2 \hat{j}_c^2 [a_c^\dagger \tilde{a}_c]_{00} \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

$$\sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\gamma\alpha\delta} v_a^2 (u_c u_d - v_d v_c) a_\gamma^\dagger a_\delta = -G \sum_a v_a^2 (u_a^2 - v_a^2) \hat{j}_a [a_a^\dagger \tilde{a}_a]_{00} \quad (\text{A.12})$$

$$\sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\delta\alpha,-\gamma} (-1)^{j_c - m_\gamma} v_a^2 u_d v_c (a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger + a_\delta a_\gamma) = -G \sum_a u_a v_a^3 \hat{j}_a^2 ([a_a^\dagger a_a^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_a \tilde{a}_a]_{00}) \quad (\text{A.13})$$

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha,-\alpha\gamma\delta} (-1)^{j_a + m_\alpha} u_a v_a (v_c v_d - u_c u_d) (a_\gamma^\dagger a_\delta^\dagger + a_\delta a_\gamma) = \\ - G \sum_{ac} u_a v_a (u_c^2 - v_c^2) \hat{j}_a^2 \hat{j}_c^2 ([a_c^\dagger a_c^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_c \tilde{a}_c]_{00}) \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Por su lado, el Hamiltoniano de partícula libre en representación cuasipartícula se obtiene usando (3.7) y (3.9):

$$H = \sum_\alpha \varepsilon_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha = \sum_a \varepsilon_a \hat{j}_a \left[ (u_a^2 - v_a^2) [a_a^\dagger \tilde{a}_a]_{00} + u_a v_a ([a_a^\dagger a_a^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_a \tilde{a}_a]_{00}) \right] \quad (\text{A.15})$$

del cual se obtiene directamente una expresión para el número de partículas N:

$$N = \sum_\alpha c_\alpha^\dagger c_\alpha = \sum_a \hat{j}_a \left[ \hat{j}_a v_a^2 + (u_a^2 - v_a^2) [a_a^\dagger \tilde{a}_a]_{00} + u_a v_a ([a_a^\dagger a_a^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_a \tilde{a}_a]_{00}) \right] \quad (\text{A.16})$$

De esta manera, juntando (A.10)-(A.15), el Hamiltoniano en representación cuasipartícula resulta

$$\boxed{H = H_0 + \sum_b H_{11}(b) [a_b^\dagger \tilde{a}_b]_{00} + \sum_b H_{20}(b) ([a_b^\dagger a_b^\dagger]_{00} - [\tilde{a}_b \tilde{a}_b]_{00}) + V_{\text{RES}}} \quad (\text{A.17})$$

El último término es la interacción residual

$$V_{\text{RES}} = \frac{1}{4} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \bar{v}_{\alpha\beta\gamma\delta} \mathcal{N} \left[ c_{\alpha}^{\dagger} c_{\beta}^{\dagger} c_{\delta} c_{\gamma} \right]_{\text{BCS}} \quad (\text{A.18})$$

donde  $\mathcal{N}[\dots]_{\text{BCS}}$  se toma respecto al vacío  $|\text{BCS}\rangle$ . Los coeficientes  $H_0$ ,  $H_{11}$  y  $H_{20}$  son

$$H_0 = \sum_a \varepsilon_a \hat{j}_a^2 v_a^2 - \frac{1}{4} G \sum_a v_a^4 \hat{j}_a^2 - \frac{1}{4} G \sum_{ac} u_a v_a u_c v_c \hat{j}_a^2 \hat{j}_c^2 \quad (\text{A.19})$$

$$H_{11}(b) = (u_b^2 - v_b^2) \hat{j}_b (\varepsilon - G v_b^2) + u_b v_b G \hat{j}_b \sum_a u_a v_a \hat{j}_a^2 \quad (\text{A.20})$$

$$H_{20}(b) = u_b v_b (\varepsilon_b - G v_b^2) \hat{j}_b - \frac{1}{4} (u_b^2 - v_b^2) G \hat{j}_b \sum_a u_a v_a \hat{j}_a^2 \quad (\text{A.21})$$

Las expresiones (A.17)-(A.21) constituyen la representación del Hamiltoniano nuclear en cuasipartículas, para una interacción de pares de emparejamiento puro.

## B. Deducción de las ecuaciones (6.27) y (6.28) de la Sección 6.3

Partiendo de (6.25),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \delta(t - t') \delta_{\alpha\alpha'} + e_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') - \frac{g f_a}{i\hbar} \sum_{\gamma>0} f_c \langle \Psi | \text{T} [c_{\alpha}^{\dagger}(t) c_{\gamma}(t) c_{\gamma}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t')] | \Psi \rangle \quad (\text{B.1})$$

El promedio del producto de los cuatro operadores anteriores se trata en la aproximación factorizada de campo medio [51]

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\alpha'}(t, t') &= \delta(t - t') \delta_{\alpha\alpha'} + e_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') \\ &- \frac{g f_a}{i\hbar} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ \langle \Psi | \text{T} c_{\alpha}^{\dagger}(t) c_{\gamma}(t) | \Psi \rangle \langle \Psi | \text{T} c_{\gamma}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t') | \Psi \rangle \right. \\ &\left. - \langle \Psi | \text{T} c_{\alpha}^{\dagger}(t) c_{\gamma}(t) | \Psi \rangle \langle \Psi | \text{T} c_{\gamma}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t') | \Psi \rangle + \langle \Psi | \text{T} c_{\alpha}^{\dagger}(t) c_{\alpha'}^{\dagger}(t) | \Psi \rangle \langle \Psi | \text{T} c_{\gamma}(t) c_{\gamma}(t) | \Psi \rangle \right] \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Se procede escribiendo la ecuación anterior en términos de  $G$  y  $\tilde{G}$  definidos en (6.14) y (6.15):

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \delta(t - t')\delta_{\alpha\alpha'} + e_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') + \frac{gf_a\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ G_{\bar{\gamma}\bar{\alpha}}(t, t) G_{\gamma\alpha'}(t, t') - G_{\gamma\bar{\alpha}}(t, t) G_{\bar{\gamma}\alpha'}(t, t') - \tilde{G}_{\bar{\alpha}\alpha'}^\dagger(t, t') \tilde{G}_{\bar{\gamma}\gamma}^\dagger(t, t) \right] \quad (\text{B.3})$$

El primer y el segundo término entre corchetes se pueden trabajar para dar,

$$\begin{aligned} & \frac{gf_a\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ G_{\bar{\gamma}\bar{\alpha}}(t, t) G_{\gamma\alpha'}(t, t') - G_{\gamma\bar{\alpha}}(t, t) G_{\bar{\gamma}\alpha'}(t, t') \right] = \\ & \frac{gf_a\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ \delta_{\bar{\gamma}\bar{\alpha}} G_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}}(t, t) \delta_{\gamma\alpha'} G_{\alpha'\alpha'}(t, t') - \delta_{\gamma\bar{\alpha}} G_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}}(t, t) \delta_{\bar{\gamma}\alpha'} G_{\alpha'\alpha'}(t, t') \right]_{m_\alpha>0} = \\ & \frac{gf_a\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \delta_{\gamma\alpha} G_{\alpha\alpha}(t, t) \delta_{\gamma\alpha'} G_{\alpha'\alpha'}(t, t') = \\ & \frac{gf_a^2\hbar}{i} \delta_{\alpha\alpha'} G_{\alpha\alpha}(t, t) G_{\alpha\alpha}(t, t') = gf_a^2 n_a \delta_{\alpha\alpha'} G_{\alpha\alpha}(t, t') = gf_a^2 n_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

donde se han usado  $G_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta} G_{\alpha\alpha}$ ,  $\delta_{\bar{\gamma}\bar{\alpha}} = \delta_{\gamma\alpha}$ ,  $G_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}} = G_{\alpha\alpha}$ ,  $\delta_{\gamma\bar{\alpha}} = 0$  y  $G_{\alpha\alpha}(t, t) = in_a/\hbar$ .

A partir de este resultado es que se obtiene la corrección  $-gf_a^2 n_a$  para la energía de partícula simple  $\varepsilon_a$ , la cual se encuentra más allá de la contribución del método Hartree-Fock [64]. Así, en términos de la autoenergía  $\tilde{e}_a = e_a - gf_a^2 n_a$ , (B.3) lee

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} G_{\alpha\alpha'}(t, t') = \delta(t - t')\delta_{\alpha\alpha'} + \tilde{e}_a G_{\alpha\alpha'}(t, t') + \frac{gf_a\hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\bar{\alpha}\alpha'}^\dagger(t, t') \tilde{G}_{\bar{\gamma}\gamma}(t, t) \quad (\text{B.5})$$

Finalmente, del hecho que  $G$  y  $\tilde{G}$  solo dependen de la diferencia  $\tau = t - t'$ , (B.1) resulta

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} - \tilde{e}_a \right) G_{\alpha\alpha'}(\tau) + i\hbar gf_a \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\bar{\gamma}\gamma}(0) \tilde{G}_{\bar{\alpha}\alpha'}^\dagger(\tau) = \delta(\tau) \delta_{\alpha\alpha'} \quad (\text{B.6})$$

que es (6.27) de la Sección 6.3.

De manera similar, partiendo de (6.26),

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') = -e_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') + \frac{gf_a}{i\hbar} \sum_{\gamma>0} f_c \langle \Psi | T [c_\gamma^\dagger(t) c_\gamma^\dagger(t) c_{\bar{\alpha}}(t) c_{\alpha'}^\dagger(t')] | \Psi \rangle \quad (\text{B.7})$$

el último término factorizado resulta

$$i\hbar \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') = -e_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') + \frac{gf_a \hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ \langle \Psi | T c_\gamma^\dagger(t) c_\gamma^\dagger(t) | \Psi \rangle \langle \Psi | T c_{\bar{\alpha}}(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') | \Psi \rangle \right. \\ \left. - \langle \Psi | T c_\gamma^\dagger(t) c_{\bar{\alpha}}(t) | \Psi \rangle \langle \Psi | T c_\gamma^\dagger(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') | \Psi \rangle + \langle \Psi | T c_\gamma^\dagger(t) c_{\alpha'}^\dagger(t') | \Psi \rangle \langle \Psi | T c_\gamma^\dagger(t) c_{\bar{\alpha}}(t) | \Psi \rangle \right] \quad (\text{B.8})$$

que, en términos de  $G$  y  $\tilde{G}$  lee

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') = -e_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') + \frac{gf_a \hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ -\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(t, t) G_{\bar{\alpha}\alpha'}(t, t') \right. \\ \left. - G_{\bar{\alpha}\gamma}(t, t) \tilde{G}_{\bar{\gamma}\alpha'}^\dagger(t, t') + \tilde{G}_{\gamma\alpha'}^\dagger(t, t') G_{\bar{\alpha}\bar{\gamma}}(t, t) \right] \quad (\text{B.9})$$

La suma del segundo y tercer término entre corchetes resulta

$$\frac{gf_a \hbar}{i} \sum_{\gamma>0} f_c \left[ -G_{\bar{\alpha}\gamma}(t, t) \tilde{G}_{\bar{\gamma}\alpha'}^\dagger(t, t') + \tilde{G}_{\gamma\alpha'}^\dagger(t, t') G_{\bar{\alpha}\bar{\gamma}}(t, t) \right] = gf_a^2 n_a \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t') \quad (\text{B.10})$$

que da la misma corrección, pero ahora para  $\tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(t, t')$ . Finalmente, en términos de  $\tau$ , la ecuación de movimiento resulta (6.28) de la Sección 2.4.2:

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial \tau} + \tilde{e}_a \right) \tilde{G}_{\alpha\alpha'}^\dagger(\tau) - i\hbar gf_a \sum_{\gamma>0} f_c \tilde{G}_{\bar{\gamma}\gamma}(0) G_{\bar{\alpha}\alpha'}^\dagger(\tau) = 0 \quad (\text{B.11})$$

## C. Evaluación de la función de Green anómala a tiempos iguales

En este apéndice se mostrará que ambos límites  $\tau \rightarrow 0^\pm$  de  $\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(\tau)$  dan el mismo resultado. Se parte de la transformada de Fourier

$$\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(\tau) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(E) e^{-iE\tau/\hbar} \frac{dE}{2\pi\hbar} \quad (\text{C.1})$$

Uno los límites establece

$$\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0^+) = \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(E) e^{-iE\tau/\hbar} \frac{dE}{2\pi\hbar} \quad (\text{C.2})$$

Para lograr la convergencia de la integral se debe cerrar el contorno en la mitad inferior del plano de energías  $E$  complejo. De esta manera el polo se encuentra en  $E = E_c - i|\eta|$ , luego

$$\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0^+) = \lim_{\tau \rightarrow 0^+} \frac{(-2\pi i)}{2\pi\hbar} \left( -\frac{\Delta_c^*}{2E_c} \right) = \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta_c^*}{2E_c} \quad (\text{C.3})$$

donde se usó que el residuo en  $E = E_c - i|\eta|$  es  $-\frac{\Delta_c^*}{2E_c}$ .

Por otro lado, el límite  $\tau \rightarrow 0^-$  establece que

$$\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0^-) = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(E) e^{-iE\tau/\hbar} \frac{dE}{2\pi\hbar} \quad (\text{C.4})$$

En este caso el contorno debe cerrarse en el semiplano superior de manera que la integral converja. Cerrando el contorno y calculando el residuo se tiene

$$\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0^-) = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \frac{(2\pi i)}{2\pi\hbar} \frac{\Delta_c^*}{2E_c} = \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta_c^*}{2E_c} \quad (\text{C.5})$$

Las ecuaciones (C.3) y (C.5) muestran que

$$\tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0^\pm) = \tilde{G}_{\gamma\bar{\gamma}}^\dagger(0^\pm) = \frac{i}{\hbar} \frac{\Delta_c^*}{2E_c} \quad (\text{C.6})$$

# Bibliografía

- [1] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, “Theory of superconductivity,” *Physical Review (Series I)*, vol. 108, pp. 1175–1204, 1957.
- [2] P. Ring and P. Schuck, *The nuclear many-body problem*. Springer Science & Business Media, 2004.
- [3] J. Byrne, *Neutrons, nuclei and matter: an exploration of the physics of slow neutrons*. Courier Corporation, 2013.
- [4] “Nudat 3.0.” <https://www.nndc.bnl.gov/nudat3/>. Accedido el 07/02/2023.
- [5] “Reaching for the horizon: The 2015 long range plan for nuclear science,” 2015.
- [6] R. A. B. David M. Brink, *Nuclear superfluidity: pairing in finite systems*. Cambridge Monographs on Particle Physics, Nuclear Physics and Cosmology, Cambridge University Press, 2005.
- [7] O. Nathan and S. Nilsson, “Alpha-, beta-, and gamma-ray spectroscopy,” *Ed. K. Siegbahn. Amsterdam*, 1965.
- [8] J. Suhonen, *From Nucleons to Nucleus: Concepts of Microscopic Nuclear Theory*. Theoretical and Mathematical Physics, Springer Berlin Heidelberg, 2007.
- [9] R. Zhang and C. Deng, “Exact solutions of the schrödinger equation for some quantum-mechanical many-body systems,” *Phys. Rev. A*, vol. 47, pp. 71–77, Jan 1993.

- [10] K. Duncan and B. Györfy, “Semiclassical theory of quasiparticles in the superconducting state,” *Annals of Physics*, vol. 298, no. 2, pp. 273–333, 2002.
- [11] R. López-Boada and E. V. Ludeña, “Hartree–fock calculations in the context of the local-scaling transformation version of density functional theory. applications to the lithium and beryllium atoms,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 69, pp. 485–496, 1998.
- [12] J. Cugnon, “Computation of s-state binding energy and wave functions in a saxon-woods potential,” *Computer Physics Communications*, vol. 6, pp. 17–23, 1973.
- [13] V. Krutov, “Rotational motion of deformed nuclei,” *Annalen der Physik*, vol. 476, pp. 263–271, 1968.
- [14] V. V. Samarin, “A self-consistent shell model of atomic nuclei and two-nucleus systems,” *Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics*, vol. 76, pp. 866–870, 2012.
- [15] H. C. Manjunatha and et al., “Investigations on the superheavy nuclei with magic number of neutrons and protons,” *International Journal of Modern Physics E*, 2020.
- [16] R. Liebermann and L. A. Jr., “Spin-orbit constants and the scaled thomas-fermi potential,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 8, pp. 1163–1166, 1968.
- [17] J. J. Sakurai and J. Napolitano, *Modern quantum mechanics*. Cambridge University Press, 2017.
- [18] D. J. Griffiths, *Introduction to quantum mechanics*. Pearson, 2018.
- [19] V. Fock, “Configuration space and second quantization,” *Z. Physik*, vol. 47, no. 11-12, pp. 446–457, 1928.
- [20] J. von Neumann, *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer-Verlag, 1932.
- [21] A. Danilewsky, *Book Review: Tensor Properties of Crystal. By D. R. Lovett*, vol. 37. John Wiley and Sons, 2002.
- [22] J. Ginibre, “Wigner-eckart theorem and simple lie groups,” *Journal of Mathematical Physics*, vol. 4, no. 5, 1963.

- [23] R. A. Römer, M. Schreiber, and T. Vojta, “Two interacting particles in a random potential: Numerical calculations of the interaction matrix elements,” *physica status solidi (b)*, vol. 211, no. 2, pp. 681–691, 1999.
- [24] A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines, “Possible analogy between the excitation spectra of nuclei and those of the superconducting metallic state,” *Phys. Rev.*, vol. 110, pp. 936–938, 1958.
- [25] B. Mond and M. A. Hanson, “Duality for variational problems,” *Journal of Mathematical Analysis and Applications*, vol. 18, no. 2, pp. 355–364, 1967.
- [26] K.-N. Huang, “Lagrangian multipliers in frozen core hartree-fock calculations,” *Physics Letters A*, vol. 64, pp. 39–40, 1977.
- [27] A. O. Barut, “On conservation of parity and time reversal and composite models of particles,” *Foundations of Physics*, vol. 13, pp. 7–12, 1983.
- [28] S. G. Nilsson, C. F. Tsang, A. Sobiczewski, Z. Szymański, S. Wycech, C. Gustafson, I.-L. Lamm, P. Möller, and B. Nilsson, “On the nuclear structure and stability of heavy and superheavy elements,” *Nuclear Physics A*, vol. 131, no. 1, pp. 1–66, 1969.
- [29] S. Stoyanov, N. Chakarov, B. Popov, and Z. Dimitrova, “Bcscont: A parallel program for solving systems of nonlinear equations,” in *International Conference on Parallel Processing*, pp. 113–120, Springer, 2011.
- [30] D. Seweryniak, M. P. Carpenter, S. Gros, A. A. Hecht, N. Hoteling, R. V. F. Janssens, and et al., “Single-neutron states in  $^{101}\text{Sn}$ ,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 99, p. 022504, Jul 2007.
- [31] I. G. Darby, R. K. Grzywacz, J. C. Batchelder, C. R. Bingham, C. J. Cartegni, and et al., “Orbital dependent nucleonic pairing in the lightest known isotopes of tin,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 105, 2010.
- [32] M. Bender, P.-H. Heenen, and P.-G. Reinhard, “Self-consistent mean-field models for nuclear structure,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 75, pp. 121–180, Jan 2003.

- [33] G. Audi, A. Wapstra, and F. Th evenin, “The ame2003 atomic mass evaluation,” *Nuclear Physics A*, vol. 729, pp. 337–676, 2003.
- [34] H. Koura and et al., “Nuclidic mass formula on a spherical basis with an improved even-odd term,” *Prog. Theor. Phys.*, vol. 113, p. 305, 2005.
- [35] W. Y. Ng and B. Castel, *Lipkin-Nogami approximation of pairing interaction*, vol. 10. The American Physical Society, 1974.
- [36] T. P.  ivkovi c, “Particle-hole symmetry and complementary quantum systems,” *International Journal of Quantum Chemistry*, vol. 34, pp. 333–359, 1988.
- [37] J. Dobaczewski, W. Nazarewicz, T. Werner, J. Berger, C. Chinn, and J. Decharge, “Self-consistent description of deformed nuclei in the interacting boson model,” *Physical Review C*, vol. 53, 1996.
- [38] C. Fahlander and et al., “Precise mass measurements of neutron-rich oxygen and sulfur isotopes,” *Phys. Rev. C*, vol. 63, no. 2, 2001.
- [39] S. V. Szwec and et al., “Neutron occupancies and single-particle energies across the stable tin isotopes,” *Phys. Rev. C*, vol. 104, 2021.
- [40] V. I. Isakov, “Inverse scattering problem in three dimensions with the fixed energy and fixed momentum transfer,” *Physics of Atomic Nuclei*, vol. 76, no. 6, pp. 828–837, 2013.
- [41] M. Wang, G. Audi, and et al., “The ame2012 atomic mass evaluation (ii). tables, graphs and references,” *Chinese Physics C*, vol. 36, no. 12, pp. 1603–2014, 2012.
- [42] M. Beiner, R. Lombard, and D. Mas, “Self-consistent calculations of ground state properties for unstable nuclei,” *Nuclear Physics A*, vol. 249, no. 1, pp. 1–28, 1975.
- [43] R. I. Betan and C. E. Repetto, “Pairing in the bcs and ln approximations using continuum single particle level density,” *Nuclear Physics A*, vol. 960, pp. 131–146, 2017.
- [44] N. Auerbach, “Effective interactions, energies and seniorities in the spectra of the nickel isotopes,” *Physics Letters*, vol. 21, pp. 57–60, 1966.

- [45] K. Sekizawa and et al., “Quasiparticle excitation energies of ni isotopes studied with the time-dependent hartree-fock method,” *Phys. Rev. C*, vol. 85, 2012.
- [46] T. Nakatsukasa, T. Inakura, and et al., “Quasiparticle excitation energies and collectivity of ni isotopes studied with the time-dependent hartree-fock method,” *Phys. Rev. C*, vol. 96, 2017.
- [47] M. Bhattacharya and G. Gangopadhyay, “Neutron drip line in odd and even mass calcium and nickel nuclei,” *Physical Review C*, vol. 72, p. 044318, 2005.
- [48] V. Soma, T. Duguet, and C. Barbieri, “Self-consistent gorkov green’s function calculations of one-nucleon spectral properties,” in *Journal of Physics: Conference Series*, vol. 337, p. 012001, IOP Publishing, 2012.
- [49] V. Soma, C. Barbieri, and T. Duguet, “Ab initio gorkov-green’s function calculations of open-shell nuclei,” *Physical Review C*, vol. 87, p. 011303, 2013.
- [50] C. J. Pethick and H. Smith, *Bose–Einstein condensation in dilute gases*. Cambridge university press, 2008.
- [51] A. Fetter, J. Walecka, and L. Kadanoff, “Quantum theory of many particle systems,” *Physics Today*, vol. 25, pp. 54–55, 1972.
- [52] V. Somà, T. Duguet, and C. Barbieri, “Ab initio self-consistent gorkov-green’s function calculations of semimagic nuclei: Formalism at second order with a two-nucleon interaction,” *Phys. Rev. C*, vol. 84, p. 064317, Dec 2011.
- [53] R. M. Id Betan and C. E. Repetto, “Algebraic gorkov solution in finite systems for the separable pairing interaction,” *Nuclear Physics A*, vol. 994, p. 121676, 2020.
- [54] L. D. Landau, J. S. Bell, M. Kearsley, L. Pitaevskii, E. Lifshitz, and J. Sykes, *Electrodynamics of continuous media*, vol. 8. elsevier, 2013.
- [55] K.-H. Schmidt and B. Jurado, “Further evidence for energy sorting from the even-odd effect in fission-fragment element distributions,” 2013.

- [56] X.-X. Sun and L. Guo, “Microscopic study of fusion reactions with a weakly bound nucleus: Effects of deformed halo,” *Phys. Rev. C*, vol. 107, p. L011601, Jan 2023.
- [57] G. Hagen, T. Papenbrock, D. J. Dean, and M. Hjorth-Jensen, “Ab initio coupled-cluster approach to nuclear structure with modern nucleon-nucleon interactions,” *Phys. Rev. C*, vol. 82, p. 034330, Sep 2010.
- [58] K. Tsukiyama, S. K. Bogner, and A. Schwenk, “In-medium similarity renormalization group for nuclei,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 106, p. 222502, Jun 2011.
- [59] C. Barbieri and M. Hjorth-Jensen, “Quasiparticle and quasihole states of nuclei around  $^{56}\text{Ni}$ ,” *Phys. Rev. C*, vol. 79, p. 064313, Jun 2009.
- [60] W. Dickhoff and C. Barbieri, “Self-consistent green’s function method for nuclei and nuclear matter,” *Progress in Particle and Nuclear Physics*, vol. 52, no. 2, pp. 377–496, 2004.
- [61] B. Jeziorski and H. J. Monkhorst, “Coupled-cluster method for multideterminantal reference states,” *Physical Review A*, vol. 24, no. 4, p. 1668, 1981.
- [62] T. Duguet, “Pairing in finite nuclei from low-momentum two- and three-nucleon interactions,” in *Fifty Years of Nuclear BCS*, pp. 229–242, WORLD SCIENTIFIC, 2013.
- [63] G.-C. Wick, “The evaluation of the collision matrix,” *Physical review*, vol. 80, no. 2, p. 268, 1950.
- [64] J. Irvine and L. Skouras, “The green function for a finite fermion system with pairing correlations,” *Proceedings of the Physical Society*, vol. 88, no. 3, p. 786, 1966.