



Desarrollo en paquetes de ondas con energía compleja para el estudio de la estructura de núcleos exóticos

Huck Santiago

Tesina de grado para la Licenciatura en Física

Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura
Universidad Nacional de Rosario

Fecha de presentación: Abril 2026

Director

Dr. Id Betan Rodolfo M.

Universidad Nacional de Rosario

Jurados

Dr. Manuel Luis O.

Universidad Nacional de Rosario

Dr. Repetto C. Enrique.

Universidad Nacional de Rosario

Resumen

La estructura nuclear de los átomos y sus propiedades son un problema que la física nuclear busca describir. Para esto se deben sortear dificultades como la cantidad de partículas que intervienen y las interacciones presentes en los núcleos. Respecto de la cantidad de partículas esto resulta un problema debido a que, en la mayoría de casos dicha cantidad es mayor a dos, por lo que una solución analítica resulta imposible si interactúan entre ellas. Además, dichas interacciones presentan una dificultad extra, debido a que no es posible obtener una expresión sencilla para su comportamiento.

En este trabajo se tiene como objetivo la implementación de paquetes de ondas complejos que permitan describir la estructura nuclear para núcleos pertenecientes a la línea de goteo, mediante los cuales es posible reducir los tiempos de cómputo requeridos debido a que hoy es el mayor limitante a la hora de calcular estructuras. Para esto se utiliza el *Modelo de Capas de Gamow*, donde las partículas que conforman el núcleo se ven influenciadas por estados de dispersión no ligados. Gracias a este modelo se logran representar la estructura de un núcleo considerando no solo los estados *ligados*, sino también estados de corta duración llamados *resonancias*, más estados de dispersión con energía compleja, todos estos estados conforman la base de Berggren. Los conceptos y su desarrollo matemático se expanden en el capítulo 1, luego, en el capítulo 2 se utilizó la representación de Berggren para analizar el comportamiento y norma de las funciones de dispersión y resonancia. También se desarrolló el código para expandir el estado $0d_{5/2}$ del ^{17}O utilizando diferentes bases, donde se usaron contornos reales y complejos, además de distintos métodos de cuadratura.

Ya realizados los códigos, se representó el estado ligado y de resonancia del ^{208}Pb en el capítulo 3 sobre contornos complejos, donde se registró el tiempo necesario para realizar la mejor aproximación y estimando el mismo si el problema tuviera más neutrones de valencia. Como el tiempo requerido era demasiado, se consultó la bibliografía donde se encontró que usan paquetes de ondas reales para el cálculo de secciones eficaces de ruptura, y por lo tanto se utilizaron dichos paquetes para calcular estructura, que se detallan en el capítulo 4, los cuales sirvieron para comprender su construcción y comportamiento. Finalmente en el capítulo 5 se desarrolló el código para implementar paquetes de onda complejos, esto último es completamente novedoso y no se ha implementado aún, ni para el cálculo de estructura nuclear ni para el cálculo de secciones eficaces. A esos paquetes se les analizó su comportamiento, convergencia y ortonormalidad. Una vez comprendido se usaron para expandir nuevamente

los estados del ^{208}Pb , obteniendo mejores aproximaciones frente al caso complejo sin paquetes de onda y una reducción del tiempo en un factor que varía entre dos y cuatro órdenes de magnitud, dependiendo de la aproximación considerada.

Por esto se concluyó la factibilidad y eficiencia de utilizar paquetes de ondas complejos, considerando siempre los problemas asociados a su ortonormalidad. Gracias a los mismos se permite el estudio de la estructura para núcleos con mayor cantidad de partículas en menos tiempo, logrando los objetivos de este trabajo.

Agradecimientos

Este trabajo representa el cierre de una etapa muy importante en mi vida y no hubiera sido posible sin el apoyo de muchas personas.

Quiero agradecer especialmente a mi director, no solo por su dirección académica, sino por su paciencia, apoyo, dedicación y compromiso durante todo el transcurso del trabajo. A la Facultad de Ciencias Exactas, Ingeniería y Agrimensura, por brindarme el espacio y la formación durante estos años de carrera. Al Instituto de Física de Rosario, por brindarme el lugar y los elementos necesarios para realizar este trabajo.

A mis padres y hermana, gracias por el esfuerzo que hicieron para que yo pudiera estudiar, siendo un soporte fundamental durante mi vida universitaria. Todo lo que logré fue gracias al apoyo incondicional de ustedes, tanto en buenos momentos como en situaciones difíciles.

Al resto de mi familia por ayudarme constantemente durante todos estos años.

A Fran , gracias por tu paciencia durante estos últimos meses, por escuchar mis problemas una y otra vez, y por acompañarme en cada momento.

A mis amigos de siempre y a los que me dio la facultad, gracias por las charlas, el acompañamiento y por formar parte de mi vida más allá de la facultad.

Índice general

Resumen	III
Agradecimientos	V
Índice general	VI
1 Marco teórico	1
1.1 Potenciales efectivos	3
1.2 Modelo de capas de Gamow	4
1.2.1 Definición de estados de una partícula	5
1.2.2 Representación de Berggren	7
2 Aplicación de la base de Berggren	11
2.1 Análisis de la ortonormalidad de los estados de dispersión discretizados	12
2.2 Expansión del estado ligado $0d_{5/2}$ de ^{17}O en base real	15
2.2.1 Caso $U_0 = 40 \text{ MeV}$	16
2.2.2 Caso $U_0 = 25 \text{ MeV}$	18
2.3 Expansión del estado ligado $0d_{5/2}$ de ^{17}O en base compleja	20
2.4 Análisis de convergencia	22
2.4.1 Sobre la cuadratura para aproximar integrales en energía	23
2.4.2 Aplicación al contorno complejo	25
2.5 Expansión de estados para ^{208}Pb	29
2.6 Estimación del tiempo de cálculo	32
3 Bases contruïdas con paquetes de onda	34
3.1 Paquetes de ondas reales	34
3.1.1 Definición de base y partición de energía	37
3.1.2 Convergencia de paquetes de onda reales	39
3.2 Paquetes de ondas complejos	43
3.2.1 Corrección de decaimiento para paquetes complejos	44
3.2.2 Sobre la norma de los paquetes de onda complejos	47
3.2.3 Expansión utilizando paquetes de onda complejos: ^{208}Pb estado ligado	49

3.2.4	Expansión utilizando paquetes de onda complejos: ^{208}Pb estado resonante	52
3.2.5	Análisis de la regularización	54
3.2.6	Tiempos de cálculo	54
4	Conclusiones	56
	Bibliografía	58
A	Código para paquetes de ondas complejos	60

Índice de figuras

1.1	Comparación entre potencial del oscilador armónico y potencial tipo Wood-Saxon. [17]	4
1.2	Plano k , donde se muestran polos correspondientes a estados ligados (verdes), antiligados(rojos), de captura(naranjas) y de decaimiento (azules). [13]	6
1.3	Resonancia ancha (izquierda) y angosta (derecha).	10
2.1	Norma promedio para distinta cantidad de funciones e intervalos de energía para funciones distintas. Para una función consigo misma (izquierda) y entre funciones de distinta energía (derecha).	14
2.2	Funciones de dispersión con diferentes valores de energía.	14
2.3	Función de onda correspondiente al estado ligado $0d_{5/2}$ del ^{17}O para un valor de $U_0 = 52,827 \text{ MeV}$	15
2.4	Comparación de la función de onda original con distintas aproximaciones para $U_0 = 40 \text{ MeV}$	17
2.5	Comparación de la función de onda original con una aproximación para $U_0 = 40 \text{ MeV}$ utilizando 1000 estados de dispersión.	18
2.6	Comparación de la función de onda original con distintas aproximaciones para $U_0 = 25 \text{ MeV}$	19
2.7	Comparación de la función de onda original con una aproximación para $U_0 = 25 \text{ MeV}$ utilizando 100 estados de dispersión.	20
2.8	Contorno de integración complejo.	21
2.9	Comparación de la función de onda original con distintas aproximaciones para $U_0 = 40 \text{ MeV}$ utilizando integración compleja.	22
2.10	Comparación de la función de onda original con una aproximación para $U_0 = 40 \text{ MeV}$ utilizando 23 estados de dispersión sobre un contorno complejo. . . .	23
2.11	Convergencia entre cuadratura trapezoidal y de Gauss-Legendre variando la cantidad de funciones en C_4	26
2.12	Distribución de funciones para cuadratura G-L sobre C_2 y C_3	29

2.13	Representación del estado ligado sin funciones de dispersión (a) y con la mejor aproximación obtenida (b); además la aproximación del estado resonante sin funciones de dispersión (c) y con la mejor aproximación obtenida (d). Todos correspondientes al nivel $0h_{11/2}$ del ^{208}Pb con la base generada por el Hamiltoniano auxiliar h_0	31
3.1	Ejemplos de paquetes de onda reales para distintos intervalos de energía. . . .	36
3.2	Valores de energía para paquetes de onda y sus respectivas funciones de dispersión.	38
3.3	Convergencias de un paquete de onda de ancho $\Delta E = 4 \text{ MeV}$ variando el número n de funciones que lo conforman.	40
3.4	Paquetes de onda para cada segmento del contorno complejo.	44
3.5	Paquetes de onda sobre el segmento C_2 modulado por la función de Fermi y sin modular.	45
3.6	Parte real e imaginaria del paquete de onda correspondiente a C_2 regularizado.	46
3.7	Comparación entre dos paquetes, uno sin tratar contra el mismo regularizado y escalado.	47
3.8	Estado ligado del ^{208}Pb para $h_{11/2}$ del Hamiltoniano h	50
3.9	Representación del estado ligado de h utilizando solamente el estado ligado de h_0 (izquierda) y utilizando el estado ligado, resonancia y estados de dispersión convergidos (derecha).	51
3.10	Estado resonante del ^{208}Pb para $h_{11/2}$ del Hamiltoniano h	52
3.11	Representación del estado resonante de h utilizando el estado ligado, resonancia y estados de dispersión convergidos (derecha).	53

Índice de tablas

2.1	Convergencia de χ^2 para los segmentos del eje real utilizando cuadratura trapezoidal	25
2.2	Convergencia de χ^2 para los segmentos del eje real utilizando cuadratura G-L	25
2.3	Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura trapezoidal ($U_0 = 40 \text{ MeV}$)	26
2.4	Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre ($U_0 = 40 \text{ MeV}$)	26
2.5	Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura trapezoidal ($U_0 = 25 \text{ MeV}$)	27
2.6	Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre ($U_0 = 25 \text{ MeV}$)	27
2.7	Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre	28
2.8	Comparativa de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre para distintos potenciales	28
2.9	Convergencia de χ^2 para los estados ligado y resonancia del ^{208}Pb	30
2.10	Tiempo de cálculo estimado para 1, 2, 3 y 4 neutrones de valencia.	33
3.1	χ^2 para distintos métodos en la construcción de paquetes de onda.	38
3.2	Ortonormalidad de paquetes de onda reales para $\Delta E = 2 \text{ MeV}$	39
3.3	Ortonormalidad de paquetes de onda reales para $\Delta E = 1 \text{ MeV}$	39
3.4	Convergencia de paquetes de onda para distintos valores de ancho en energía. ($U_0 = 25 \text{ MeV}$)	41
3.5	Convergencia de paquetes de onda para distintos valores de ancho en energía. ($U_0 = 40 \text{ MeV}$)	41
3.6	Convergencia de paquetes de onda para distintos valores de ancho en energía. ($U_0 = 42,5 \text{ MeV}$)	42
3.7	χ^2 , ancho y cantidad de paquetes de onda para el estado ligado del ^{17}O	42
3.8	Variación de la norma del paquete de onda en función del ángulo. Nótese la divergencia numérica en el ángulo 1.5.	48

3.9	Variación del solapamiento entre dos paquetes de onda en función del ángulo de rotación.	49
3.10	Representación del estado ligado de ^{208}Pb utilizando paquetes de onda complejos, resonancia y estado ligado correspondientes a h_0	51
3.11	Representación del estado resonante de ^{208}Pb utilizando el estado ligado, resonancia y paquetes de onda complejos de h_0	53
3.12	Tiempos de cálculo para 3 neutrones de valencia utilizando los distintos métodos de aproximación.	55

El núcleo de un átomo está conformado por una cantidad A de nucleones, que son los protones y neutrones. Para poder describirlo físicamente es necesario tener en cuenta las interacciones entre los mismos, esto resulta complejo debido a que, no existe una solución general para un sistema con estas características. El modelo de capas o "Shell Model" resulta útil para este fin porque permite simplificar el problema aproximando las interacciones por un campo medio. Gracias a esto es posible reducir el problema a partículas independientes que están sometidas a un potencial efectivo.

Tanto protones como neutrones son fermiones por lo que cumplen el principio de exclusión de Pauli. Por lo tanto, al estar sometidos al potencial efectivo, las energías de los mismos se discretizan formando lo que se conoce como capa, esto es así porque la energía entre dos fermiones de una misma capa es mucho menor a la energía entre fermiones de capas distintas. Una implicación de dicha estructura en los niveles de energía es que las configuraciones donde los nucleones llenan completamente una capa resultan mucho más estables que cuando la capa se encuentra semi-llena. Dichos núcleos privilegiados cuentan con un número especial de protones y neutrones, llamados números mágicos; y en consecuencia se llaman núcleos mágicos, los cuales presentan una estabilidad notablemente mayor a la de otros núcleos [17].

La utilización del Modelo de Capas radica en la buena concordancia que poseen los resultados teóricos con los experimentales [16], donde se muestra el comportamiento de capas en los niveles de energía.

Para describir los niveles de energía mencionados, es necesario plantear el Hamiltoniano del sistema que se conforma por A nucleones interactuantes. La interacción se considera de pares y se aproxima por un potencial central de la forma [16]:

$$H = \sum_{i=1}^A T_i + \sum_{i<j=1}^A V_{ij} \quad (1.1)$$

$$H = \sum_{i=1}^A \left[\left(-\frac{\hbar^2}{2m_i} \right) \nabla_{r_i}^2 + U(r_i) \right] + \left[\sum_{i<j=1}^A V_{ij} - \sum_{i=1}^A U(r_i) \right] \quad (1.2)$$

$$H = \sum_{i=1}^A h(r_i) + \left[\sum_{i<j=1}^A V_{ij} - \sum_{i=1}^A U(r_i) \right] \quad (1.3)$$

$$H = H_0 + V_{res}, \quad (1.4)$$

donde T_i es la energía cinética de cada nucleón y V_{ij} la interacción entre pares. $U(r_i)$ es el campo medio efectivo, que reagrupando los términos permite definir el Hamiltoniano de partículas independientes H_0 y la interacción residual V_{res} . Cuando $U(r_i)$ es una buena aproximación de la interacción, los elementos de matriz $V_{res} \ll H_0$.

La función de onda correspondiente a H_0 está determinada por el determinante de Slater de las autofunciones de $h(r)$, donde las mismas son las de una partícula en un potencial central. En representación coordenada $h(r)$ posee la siguiente forma [17]:

$$h(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_{r_i}^2 + U(r) \quad (1.5)$$

$$h(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + U(r) \quad (1.6)$$

Las autofunciones de un Hamiltoniano con esta estructura es lo que se conoce como función de onda de una partícula, las cuales poseen soluciones de la forma:

$$\psi_{n, l, m_l, m_s} = \frac{1}{r} u_{n, l}(r) Y_{l, m_l}(\theta, \phi) \chi_{m_s}, \quad (1.7)$$

donde $u_{n, l}(r)$ es la función radial que debe calcularse con las condiciones de contorno adecuadas, $Y_{l, m_l}(\theta, \phi)$ los armónicos esféricos y χ_{m_s} la función de espín. Se tiene luego que $\{n, l, m_l, m_s\}$ son buenos números cuánticos y resulta:

$$\hat{L}^2 |n, l, m_l, m_s\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, m_l, m_s\rangle \quad (1.8)$$

$$\hat{L}_z |n, l, m_l, m_s\rangle = \hbar m_l |n, l, m_l, m_s\rangle \quad (1.9)$$

$$\hat{S}_z |n, l, m_l, m_s\rangle = \frac{\hbar}{2} m_s |n, l, m_l, m_s\rangle \quad (1.10)$$

Para lograr resultados más realistas es necesario sumar un potencial de interacción espín-órbita el cual actúa sobre la superficie del núcleo, debido a esto en núcleos de mayor tamaño que poseen más superficie es fundamental incluir dicha interacción. Un efecto importante que surge de incluir este potencial es la ruptura de la degeneración del momento angular total $j = l \pm \frac{1}{2}$. La ruptura genera resultados más similares a los obtenidos experimentalmente. Al considerar el momento angular general J , se definen los siguientes operadores con sus

autovalores:

$$\hat{J}^2 |n, l, j, m_j\rangle = \hbar^2 j(j+1) |n, l, j, m_j\rangle \quad (1.11)$$

$$\hat{J}_z |n, l, j, m_j\rangle = \hbar m_j |n, l, j, m_j\rangle \quad (1.12)$$

$$\hat{L}^2 |n, l, j, m_j\rangle = \hbar^2 l(l+1) |n, l, j, m_j\rangle \quad (1.13)$$

$$\hat{S}^2 |n, l, j, m_j\rangle = \hbar^2 s(s+1) |n, l, j, m_j\rangle \quad (1.14)$$

$$\hat{L} \cdot \hat{S} |n, l, j, m_j\rangle = \frac{\hbar^2}{2} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] |n, l, j, m_j\rangle \quad (1.15)$$

La importancia de la función de onda de una partícula radica en que es muy útil para modelizar sistemas complejos. Un ejemplo de esto es el caso donde el último neutrón se encuentra en presencia del campo producido por el resto del núcleo, para núcleos con un nucleón en un núcleo mágico es una muy buena aproximación.

1.1. Potenciales efectivos

Una vez que se obtienen las autofunciones de momento angular para $\hat{H}_0$ es necesario definir el tipo de potencial central efectivo $U(r)$ con el cual quedan definidas las funciones radiales $u_{n,j}$. Una forma de obtener un potencial que se asemeje lo más posible a la interacción entre las partículas es utilizar el método de Hartree-Fock, donde se proponen funciones de onda base que mediante un proceso iterativo autoconsistente obtiene los autovalores de energía y las funciones de onda cuando se cumple un criterio de convergencia [3].

Existe otra forma de hallar un campo medio adecuado que es proponiendo potenciales que reproduzcan el comportamiento observado experimentalmente. Dentro de las opciones se utilizan modelos como pozos de potencial cuadrados ó oscilador armónico (OA); ambas opciones muestran resultados favorables para predecir los niveles de energía y los números mágicos. Durante el desarrollo de este trabajo se optó por la utilización de un potencial fenomenológico de tipo Wood-Saxon (WS), el cual posee la siguiente estructura [17]:

$$U(r) = \frac{U_0}{1 + e^{(r-R_0)/a}} \quad (1.16)$$

Donde U_0 es la intensidad del potencial, $R_0 = r_0 A^{1/3}$ es el radio nuclear que depende de la cantidad de nucleones y a que es la difusividad. Este potencial posee una ventaja frente al potencial del oscilador armónico porque da resultados más realísticos sobre el comportamiento y la fuerza a la que se encuentran sometidos los nucleones. En la Figura 1.1 se realiza una comparación entre el potencial del oscilador armónico y del tipo Wodd-Saxon, mostrando

las diferencias gracias a la difusividad y cómo se mantiene aproximadamente constante el potencial WS dentro del núcleo, lo que indicaría una interacción casi nula entre los nucleones.

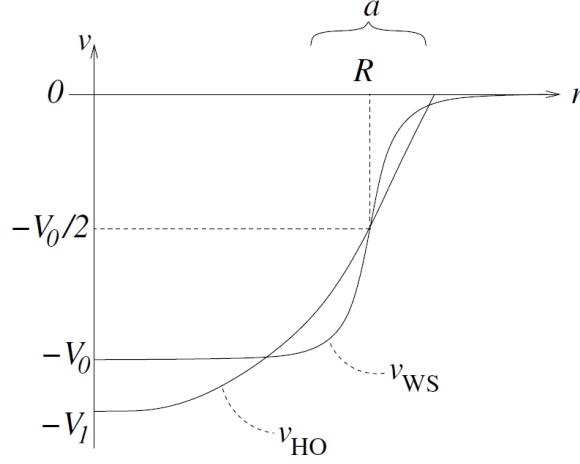


Figura 1.1: Comparación entre potencial del oscilador armónico y potencial tipo Wood-Saxon. [17]

Como es necesario considerar la interacción espín-órbita, la expresión analítica para el potencial resultante de dicha interacción más el potencial WS, se obtiene de sumar WS con $\frac{1}{r}$ por la derivada de Wood-Saxon. A continuación se detalla la expresión [1].

$$U(r) = \frac{U_0}{1 + e^{(r-R_0)/a}} + \frac{U_{so}}{r_0^2} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(\frac{1}{1 + e^{(r-R_0)/a}} \right) \hat{L} \cdot \hat{S} \quad (1.17)$$

Este potencial se utiliza con frecuencia debido a que describe correctamente los números mágicos y una mayor separación de energía entre capas, lo que es observado de forma experimental en un gran número de núcleos [17].

1.2. Modelo de capas de Gamow

Muchos de los núcleos que se encuentran en la línea de goteo presentan un estado peculiar, la resonancia. La misma se caracteriza por ser procesos de decaimiento a estados no ligados, es decir que ciertos nucleones durante cortos períodos de tiempo se encuentran en las cercanías del núcleo y luego se alejan del mismo. Estos sistemas no se pueden representar utilizando el modelo de capas, puesto que, en dicho marco teórico los mismos son sistemas cerrados que se representan mediante el espacio de Hilbert. En el mismo no es posible tener vectores de estado con crecimientos exponenciales, como es el caso de las resonancias, por lo que se consideran estados no físicos. Se ha intentado resolver este problema mediante distintas técnicas como extraer la parte real de la resonancia y contemplarla en valores de energía reales positivos, otra

forma es juntar la función de onda de un estado ligado dentro de la región del núcleo junto con una solución asintótica en la parte exterior. Ambos métodos no son suficientemente legítimos para representar el fenómeno de resonancia por lo que el modelo de capas no resulta adecuado para describir estos estados y es necesario buscar alternativas.

Una solución para lograr una correcta descripción de las resonancias es utilizar el Modelo de capas de Gamow o 'Gamow Shell Model' (MCG), en el cual el espacio de Hilbert se extiende al espacio de Hilbert equipado, donde las funciones de onda de las resonancias se describen naturalmente mediante los estados de Gamow [2, 13], que son los autovectores del Hamiltoniano con autovalores complejos y que temporalmente presentan comportamientos exponenciales de decaimiento. Ahora el sistema ya no es cerrado, sino que contempla al núcleo y su entorno, con lo cual aparece un acoplamiento con el continuo de energía que son los estados de dispersión. En los núcleos débilmente ligados o inestables sus nucleones de valencia presentan un mayor acople con el continuo de energía, mientras que, cuanto más estable es un núcleo, la correlación con el continuo es menor.

La descripción del formalismo se realiza a partir del espacio de Hilbert equipado, donde se consideran dos conjuntos: D que es el conjunto de todos los estados de resonancias discretas y el subconjunto B que consiste en los estados de dispersión con energía compleja. Con estos dos conjuntos el sistema es abierto e interactúa con el medio, permitiendo acoplamientos con el continuo de energía.[10, 13]

1.2.1. Definición de estados de una partícula

Como se desarrolló anteriormente, es necesario hallar las funciones que son solución a la ecuación de Schrödinger, ya se mostró que la parte angular está dada por los armónicos esféricos, por lo que resta hallar la parte radial. Para esto vemos que la ecuación a resolver para la parte radial es:

$$u''(k, l) = \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + v_l(r) - k^2 \right) u(k, l), \quad (1.18)$$

donde $v_l(r)$ es el potencial y k es el momento lineal que admite valores complejos. El potencial se considera real salvo que se indique lo contrario. Es necesario analizar los casos límite para la ecuación (1.18) cuando $r \rightarrow \infty$ y $r \rightarrow 0$:

$$u''(k, r) = \left(\frac{l_0(l_0+1)}{r^2} + \frac{v_{c_0}}{r} - k^2 \right) u(k, r), \quad r \rightarrow 0 \quad (1.19)$$

$$u''(k, r) = \left(\frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{v_c}{r} - k^2 \right) u(k, r), \quad r \rightarrow \infty \quad (1.20)$$

Se tiene que v_c y v_{c_0} son reales. Finalmente considerando el comportamiento del potencial en $r = 0$, se reduce la ecuación (1.18) a Ec. (1.19) y Ec. (1.20), considerando que $0 < r < r_0$ y $r > R$ respectivamente [13].

Como se admiten valores complejos, se debe analizar el comportamiento de las funciones de onda para todo el plano. Dicho análisis se realiza mediante la matriz de dispersión S , hallando que los polos de la matriz con k solo imaginario positivo corresponden a estados ligados; si posee solo parte real positiva son estados de dispersión que se corresponden al continuo y, si posee polos que tienen componente real positiva y componente imaginaria negativa, los mismos son los estados de resonancia [13]. Estos estados poseen una parte real E_0 y una imaginaria $\frac{\Gamma}{2}$ que se encuentra asociado al ancho de la misma, si $\Gamma \ll E_0$ se dice que es una resonancia angosta y si son comparables se dice que es una resonancia ancha. Además pueden existir polos con valores de k reales negativos e imaginarios negativos correspondientes a resonancias de captura; y también con k imaginario negativo puro correspondientes a estados antiligados [13], tanto las resonancias de captura como los estados antiligados no son de interés en este trabajo, en la figura 1.2 se muestran todos los puntos que pueden aparecer en el plano k para un potencial de rango finito:

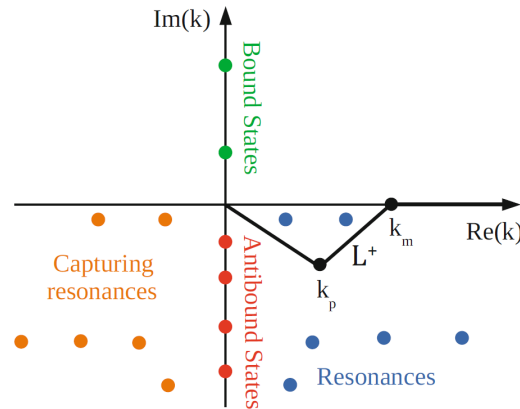


Figura 1.2: Plano k , donde se muestran polos correspondientes a estados ligados (verdes), antiligados (rojos), de captura (naranjas) y de decaimiento (azules). [13]

Es posible obtener la forma funcional asintótica correspondiente a cada tipo de polo que posee la matriz de dispersión [13]:

- **Ligados** ($k = i\beta$): $u(r) \propto e^{-\beta r}$, $\beta > 0$
- **Antiligados** ($k = -i\delta$): $u(r) \propto e^{\delta r}$, $\delta > 0$

- **Captura** ($k = \alpha - i\gamma$): $u(r) \propto e^{-i\alpha r} e^{\gamma r}$, $\alpha < 0$, $\gamma > 0$ función de Hankel de segunda especie $H_l^{(2)}$
- **Resonancia** ($k = \alpha + i\gamma$): $u(r) \propto e^{i\alpha r} e^{\gamma r}$, $\alpha > 0$, $\gamma > 0$ función de Hankel de primera especie $H_l^{(1)}$

Cabe destacar que las funciones correspondientes al continuo de energía ($k > 0$) se encuentran normalizadas a la delta de Dirac [5]. La ecuación (1.21) muestra como las funciones de Gamow son ortogonales y poseen dicha norma [5]:

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty e^{-\varepsilon r^2} \hat{u}(\hat{k}_1, r)^* u(k_2, r) dr = \delta_{1,2} \quad (1.21)$$

Esta expresión muestra que las funciones de dispersión correspondientes a un estado para dos valores de k distintos, son ortonormales. Lo que es de gran utilidad si se busca usar las mismas para representar otros estados, debido a que, al cambiar k la función asociada es ortonormal a las otras funciones con otros valores k' .

1.2.2. Representación de Berggren

Resulta necesario definir una base en el espacio de Hilbert equipado para poder describir las resonancias, la cual debe contemplar obligatoriamente el acople con el continuo, además de los estados ligados usuales del modelo de capas. Al adoptar valores complejos cuando se tiene en cuenta el continuo, k pertenece al cuarto cuadrante del plano complejo, donde se encuentran los estados con acoples al continuo como son las resonancias y los estados de dispersión. Debido a esto la base de Berggren consta de una parte discreta perteneciente a estados ligados y resonancias además de una parte perteneciente a los estados de dispersión, que es una integral sobre el espacio k . Como el mismo es complejo, dicha integral se debe definir sobre un contorno de integración L , los cuales se van a ubicar en el cuarto cuadrante o a lo largo del eje real como se muestra en la figura 1.2.

Una vez definido un contorno de integración, entre L y el eje real positivo pueden hallarse polos, asociados a estados de decaimiento que son las resonancias. Como estos estados aportan información fundamental del sistema, deben incluirse en la base de Berggren. El formalismo para incluirlos requiere entonces, que el contorno sea orientado positivo L^+ y, gracias al Teorema de los Residuos, el polo es incluido al momento de realizar la integración, lo que

permite tener en cuenta la función de onda de la resonancia. Como ahora la integración compleja tiene en cuenta los estados de decaimiento, la relación de completitud de Berggren [2] resulta:

$$\sum_n u_n(r)u_n(r') + \int_{L^+} u_k(r)u_k(r')dk = \delta(r - r') \quad (1.22)$$

En este caso $u_n(r)$ son los estados ligados y las resonancias presentes entre el eje real y el contorno L^+ de estados de dispersión con k complejo. Es posible trabajar con energías en lugar de momentos lineales, pasando a un contorno de integración P^+ en el plano de energía, además de separar en dos términos los estados ligados y las resonancias, por lo que la relación de completitud es:

$$\sum_i u_i(r)u_i(r') + \sum_j u_j(r)u_j(r') + \int_{P^+} u_\varepsilon(r)u_\varepsilon(r')d\varepsilon = \delta(r - r') \quad (1.23)$$

En la ecuación (1.23) $u_i(r)$ son los estados ligados, $u_j(r)$ las resonancias entre el eje real y el contorno; y $u_\varepsilon(r)$ funciones de dispersión pertenecientes al contorno P^+ con valores de energía complejos normalizados a la delta de Dirac en energía.

Es posible ahora expandir un estado dado $|\psi\rangle$ en la base de Berggren:

$$h = T + V \quad (1.24)$$

$$h = T + V + V_0 - V_0 \quad (1.25)$$

$$h = T + V_0 + V - V_0 \quad (1.26)$$

$$h = h_0 + \delta V, \quad (1.27)$$

donde T y V son las energías cinética y potencial, h es el Hamiltoniano correspondiente al estado que se quiere expandir, $h_0 = T + V_0$ que es el Hamiltoniano ficticio creado para definir la base de Berggren, V_0 es el potencial asociado a h_0 y $\delta V = V - V_0$ es un remanente de interacción. Ahora como h_0 crea una base de autoestados $|u_i\rangle^{(0)}$, es posible representar los autoestados de h , que son $|\psi\rangle$, sobre la misma. Esto se muestra en las ecuaciones (1.28) y (1.30)

$$h |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1.28)$$

$$(h_0 + \delta V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (1.29)$$

$$\begin{aligned}
h_0 |u_i^{(0)}\rangle &= E_i^{(0)} |u_i^{(0)}\rangle & (\text{Estados ligados}) \\
h_0 |u_j^{(0)}\rangle &= E_j^{(0)} |u_j^{(0)}\rangle & (\text{Resonancias}) \\
h_0 |u^{(0)}(\varepsilon)\rangle &= \varepsilon |u^{(0)}(\varepsilon)\rangle & (\text{Estados de dispersión})
\end{aligned} \tag{1.30}$$

Una aclaración importante es que E_j es complejo debido a que las resonancias poseen una parte real E_0 y una imaginaria $-i\frac{\Gamma}{2}$. Mientras que ε puede adquirir valores reales o complejos, dependiendo de que estados se estén considerando sobre el contorno de integración, ε , pertenece al contorno P^+ definido anteriormente. A continuación se muestra como es posible expandir $|\psi\rangle$ sobre la base de Berggren generada por h_0 :

$$|\psi\rangle = \mathbb{I} |\psi\rangle \tag{1.31}$$

$$= \left[\sum_i |u_i^{(0)}\rangle \langle u_i^{(0)}| + \sum_j |u_j^{(0)}\rangle \langle u_j^{(0)}| + \int_{P^+} d\varepsilon |u^{(0)}(\varepsilon)\rangle \langle u^{(0)}(\varepsilon)| \right] |\psi\rangle \tag{1.32}$$

$$= \sum_i |u_i^{(0)}\rangle \langle u_i^{(0)}|\psi\rangle + \sum_j |u_j^{(0)}\rangle \langle u_j^{(0)}|\psi\rangle + \int_{P^+} d\varepsilon |u^{(0)}(\varepsilon)\rangle \langle u^{(0)}(\varepsilon)|\psi\rangle \tag{1.33}$$

$$= \sum_i c_i |u_i^{(0)}\rangle + \sum_j c_j |u_j^{(0)}\rangle + \int_{P^+} d\varepsilon c_\varepsilon |u^{(0)}(\varepsilon)\rangle \tag{1.34}$$

Como se puede ver, en la última expresión se utilizaron los coeficientes c_i , c_j y c_ε , que son las siguientes proyecciones:

$$c_i \equiv \langle u_i^{(0)}|\psi\rangle \tag{1.35}$$

$$c_j \equiv \langle u_j^{(0)}|\psi\rangle \tag{1.36}$$

$$c_\varepsilon \equiv \langle u^{(0)}(\varepsilon)|\psi\rangle \tag{1.37}$$

Ahora es posible pasar este desarrollo a la representación coordenada donde resulta:

$$\langle r|\psi\rangle = \sum_i c_i \langle r|u_i^{(0)}\rangle + \sum_j c_j \langle r|u_j^{(0)}\rangle + \int_{P^+} d\varepsilon c_\varepsilon \langle r|u^{(0)}(\varepsilon)\rangle \tag{1.38}$$

$$\psi(r) = \sum_i c_i u_i^{(0)}(r) + \sum_j c_j u_j^{(0)}(r) + \int_{P^+} d\varepsilon c_\varepsilon u^{(0)}(r, \varepsilon) \tag{1.39}$$

Y finalmente queda mostrar cómo se calculan los coeficientes en la representación coordenada:

$$c_i = \langle u_i^{(0)} | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int_0^\infty \langle u_i^{(0)} | r \rangle \langle r | \psi \rangle dr = \int_0^\infty u_i^{(0)}(r) \psi(r) dr \quad (1.40)$$

$$c_j = \langle u_j^{(0)} | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int_0^\infty \langle u_j^{(0)} | r \rangle \langle r | \psi \rangle dr = \int_0^\infty u_j^{(0)}(r) \psi(r) dr \quad (1.41)$$

$$c_\varepsilon = \langle u^{(0)}(\varepsilon) | \mathbb{1} | \psi \rangle = \int_0^\infty \langle u^{(0)}(\varepsilon) | r \rangle \langle r | \psi \rangle dr = \int_0^\infty u^{(0)}(r, \varepsilon) \psi(r) dr \quad (1.42)$$

Es necesario aclarar que cuando ε es real, la fase del estado de dispersión se elige tal que $u^{(0)}(r, \varepsilon)$ sea real. Esto muestra como es posible hallar los coeficientes proyectando la función de onda $\psi(r)$ sobre las funciones pertenecientes a la base de Berggren producida por h_0 en representación coordenada.

Como se mostró en la ecuación (1.30), las resonancias poseen valores de energía complejos. La parte real indica la posición en el plano de energía mientras que la parte imaginaria indica el ancho de decaimiento. Este ancho es fundamental, ya que valores pequeños de $\frac{\Gamma}{2}$ indican resonancias angostas y, por el contrario, valores grandes indican resonancias anchas. En la figura 1.3 se muestran dos funciones de onda correspondientes a resonancias, evidenciando las diferencias entre angosta y ancha.

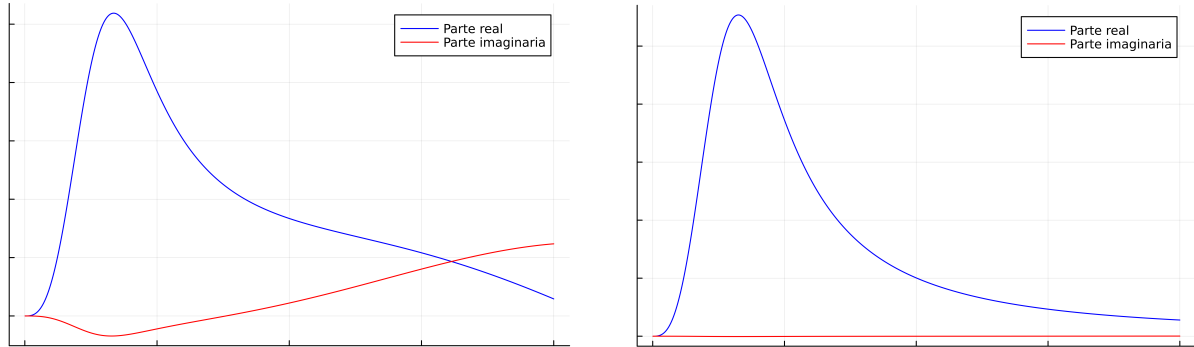


Figura 1.3: Resonancia ancha (izquierda) y angosta (derecha).

Estas imágenes muestran cómo la función de onda en la resonancia ancha disminuye su amplitud de forma menos acentuada, lo que puede resultar en un problema si se quiere representar dicho estado, debido a que no se encuentra tan localizado, además, para valores de r mucho mayores que el radio nuclear, tanto la parte real como imaginaria, oscilan con amplitudes crecientes. El desarrollo para representar distintas funciones, tanto de estados de decaimiento como ligados se muestra en el capítulo siguiente.

2

Aplicación de la base de Berggren

Para realizar las expansiones de los autoestados asociados a $\hat{h}$ es necesario calcular la función de onda que se desea expandir $\psi(r)$ así como las funciones correspondientes a la base $u_0(r)$. Dicha tarea puede resultar complicada de resolver analíticamente debido a que se tienen en cuenta dos potenciales: el centrífugo y el central, por lo que se recurre a métodos numéricos que proporcionan las soluciones.

En este trabajo se utilizó el código ANTI [9] el cual permite obtener las funciones de onda radiales de una partícula de estados ligados, antiligados, resonancias y de dispersión (tanto para energía real como compleja), considerando el potencial central de tipo Wood-Saxon. Para esto es necesario ingresar los siguientes datos:

- | | |
|-------------------------------|---|
| ■ Z : número atómico | ■ a : difusividad |
| ■ A : número másico | ■ V_{so} : valor del potencial de acople espín-órbita |
| ■ U_0 : valor del potencial | ■ r_0 : radio nuclear |

Este código utiliza métodos de perturbación por partes adaptativo [19, 20] , proporcionando una potente herramienta numérica para resolver el problema complejo de autovalores de la ecuación de Schrödinger radial. Siendo uno de ellos, el método de potencial constante. También presenta métodos apropiados para calcular la solución en la proximidad del origen y en la región asintótica. Como se recurre a métodos numéricos es necesario definir un radio máximo (r_{max}) hasta el cual calcular la solución junto a un intervalo (r_{step}) que es la distancia entre dos puntos calculados. Una vez definidos dichos parámetros se especifica también el tipo de partícula de valencia, pudiendo ser un protón o neutrón, en este trabajo siempre se utilizaron neutrones. El código ANTI se encuentra programado en FORTRAN mientras que todos los códigos desarrollados para expandir las funciones de onda en este trabajo se realizaron con el lenguaje de programación Julia y son originales del autor de la presente tesina (el Apéndice A muestra uno de los códigos desarrollados a modo de ejemplo).

2.1. Análisis de la ortonormalidad de los estados de dispersión discretizados

Para representar estados sobre la base de Berggren, de la forma mostrada en la ecuación (1.39), se debe considerar que la parte más influyente para núcleos inestables es el continuo. Se analizó inicialmente el comportamiento de las funciones de dispersión con energía real, utilizando como estado $d_{5/2}$ del núcleo ^{17}O , el cual posee los siguientes parámetros en el potencial de Wood-Saxon [1]:

- $U_0 = 52,827 \text{ MeV}$
- $r_0 = 1,245 \text{ fm}$
- $a = 0,7 \text{ fm}$
- $V_{so} = 13,492 \text{ MeV}$

Como los estados de dispersión se encuentran normalizados a la delta de Dirac, es necesario calcular la norma de los mismos. Mediante el desarrollo de la ecuación (2.1) es posible observar la deducción de la ortonormalidad para estados de dispersión con energía distinta ϵ y ϵ' :

$$\delta(\epsilon - \epsilon') = \int_0^\infty u(r, \epsilon) u(r, \epsilon') dr \quad (2.1)$$

Si se discretizan los estados de dispersión en la energía se tiene:

$$\delta(r - r') = \int_0^\infty u(r, \epsilon) u(r', \epsilon) d\epsilon \approx \sum_i h_i u(r, \epsilon_i) u(r', \epsilon_i) = \sum_i w_i(r) w_i(r'), \quad (2.2)$$

donde $w_i(r) = \sqrt{h_i} u(r, \epsilon_i)$ y h_i es el peso de la cuadratura utilizada para aproximar la integral. Con esto es posible escribir la delta de Dirac para dos energías ϵ_i y ϵ_j de la siguiente forma:

$$\delta(\epsilon_i - \epsilon_j) = \int_0^\infty u(r, \epsilon_i) u(r, \epsilon_j) dr = \int_0^\infty \frac{w_i(r)}{\sqrt{h_i}} \frac{w_j(r)}{\sqrt{h_j}} dr \quad (2.3)$$

Y luego reescribiendo la ecuación (2.3) de la siguiente forma:

$$\int_0^\infty w_i(r) w_j(r) dr = \sqrt{h_i} \sqrt{h_j} \delta(\epsilon_i - \epsilon_j) \stackrel{1}{=} h_i \delta(\epsilon_i - \epsilon_j) \stackrel{2}{\approx} \delta_{i,j}, \quad (2.4)$$

donde (1) vale porque al ser una delta es no nulo para $i = j$ y luego (2) es debido a que, al aumentar el número de funciones, para dos estados contiguos en energía $\delta(\epsilon_i - \epsilon_j)$ mientras

que h_i disminuye, lo que permite, formalmente, reemplazar la delta de Dirac por una delta de Kronecker. Mostrando que al realizar la discretización, estados con energías distintas deben ser ortonormales entre sí. Sin embargo; al realizar los cálculos numéricos se encuentran discrepancias con la teoría, que se exponen a continuación.

La norma se calculó utilizando la integración numérica trapezoidal, que se desarrolla de la forma mostrada en la ecuación (2.5).

$$||w_i(r)||^2 = \int_0^{r_{max}} w_i(r) w_i(r) dr \approx \sum_k w_i(r_k) w_i(r_k) r_{step}, \quad r_{step} = 0,01 fm \quad (2.5)$$

A las funciones de dispersión fue necesario multiplicarlas por un factor para lograr su normalización en el plano de energía, debido a que las mismas se encuentran normalizadas en el espacio de momentos con un factor π (Eq. 1 [11]). Por esto se halló que para pasar al espacio de energía es necesario utilizar un coeficiente de renormalización mostrado en la ecuación (2.6):

$$R = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sqrt{\frac{k}{c}}, \quad c = \frac{2\mu}{\hbar^2}, \quad (2.6)$$

donde k es el valor del momento lineal y la constante $\frac{2\mu}{\hbar^2}$ es el factor de conversión entre momento y energía con unidad $\frac{1}{MeV fm^2}$ que brinda el propio código para el caso del ^{17}O .

Para estudiar la ortonormalidad se calcularon dos magnitudes, la primera es la norma promedio de las n funciones de onda y la segunda es el promedio de la norma para funciones ortogonales (es decir, entre funciones con distinto valor de energía ϵ), dicho promedio se calcula sobre un intervalo de energía de la manera presentada en la ecuación (2.7).

$$N^2 = \frac{1}{n} \sum_i \sum_k w_i(r_k) w_i(r_k) r_{step}, \quad r_{step} = 0,01 fm \quad (2.7)$$

Luego para hallar el valor de la norma entre funciones de energía distinta se utilizó la expresión (2.8)

$$N^2 = \frac{2}{n(n-1)} \sum_{i < j} \sum_k w_i(r_k) w_j(r_k) r_{step}, \quad r_{step} = 0,01 fm, \quad (2.8)$$

donde el factor $\frac{2}{n(n-1)}$ es la cantidad de combinaciones que existen cumpliendo que $i < j$.

Para tener una muestra amplia de la ortonormalidad vamos a considerar tres rangos de energía máxima que fueron 50, 100 y 200 MeV, sobre cada uno el número de funciones para calcular el promedio fue aumentando de 2 a 100. En la figura 2.1 se observan los valores de norma promedio para los tres intervalos de energía para una función consigo misma y entre funciones de distinta energía

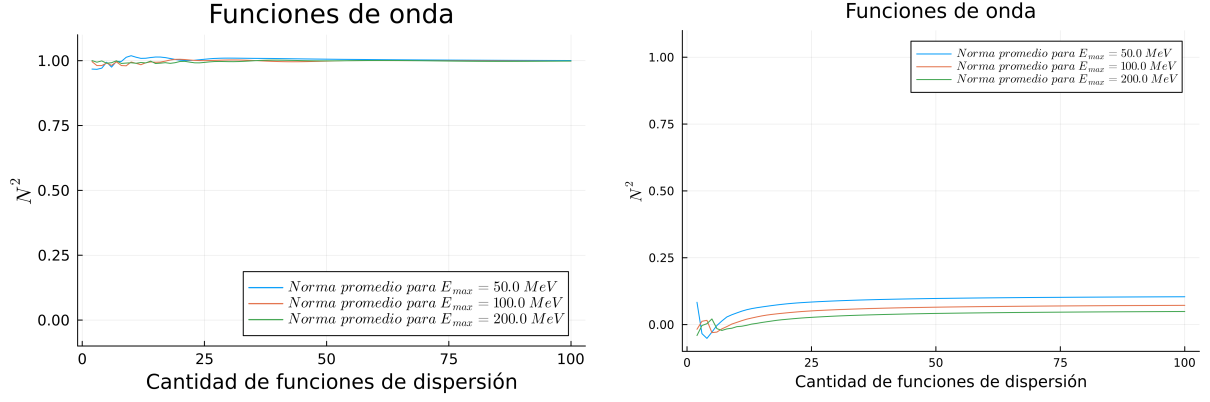


Figura 2.1: Norma promedio para distinta cantidad de funciones e intervalos de energía para funciones distintas. Para una función consigo misma (izquierda) y entre funciones de distinta energía (derecha).

Se observó que la norma promedio de cada función es muy cercana a 1 mientras que la norma promedio para funciones de distinta energía ronda entre los valores 0.1-0.05. Estos valores, aunque no estrictamente cero se consideró aceptable debido a que no era esperable que se cumpla la ortonormalidad teórica en el cálculo numérico. Los cambios bruscos que presentan las normas cuando se utilizan pocas funciones de dispersión se debe a que, a baja energía, las oscilaciones tienen longitudes de onda más largas permitiendo que la norma pueda adquirir valores mayores a 1 si el radio máximo de integración no es suficientemente grande, afectando el promedio. Cuando la cantidad de funciones aumenta, la norma se encuentra más controlada y es posible compensar dichas variaciones a baja energía con el resto de las funciones. El comportamiento de la longitud de onda se muestra en la figura 2.2.

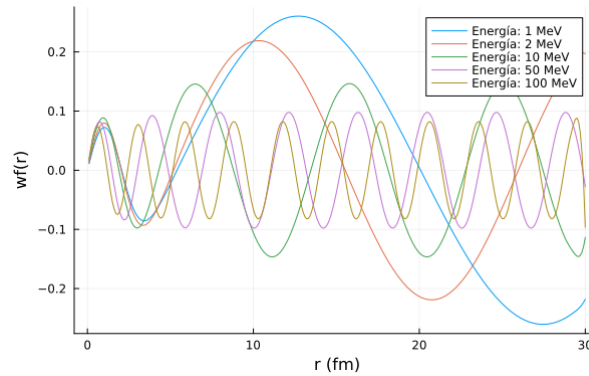


Figura 2.2: Funciones de dispersión con diferentes valores de energía.

Finalmente, se concluyó que los estados no son rigurosamente ortonormales entre sí. En las aplicaciones veremos que, aun con esta deficiencia, las funciones expandidas con ellas convergen a la función exacta.

2.2. Expansión del estado ligado $0d_{5/2}$ de ^{17}O en base real

Para analizar el comportamiento de la función de onda dependiendo de la influencia de una resonancia, se expandió el estado ligado del oxígeno que posee una energía de $E = -4,12 \text{ MeV}$ y se muestra en la figura 2.3. Dicho estado se expandió sobre dos bases, una generada con un valor de potencial de $U_0 = 25 \text{ MeV}$ y otra con $U_0 = 40 \text{ MeV}$, donde el resto de parámetros se mantuvieron constantes y tienen los siguientes valores [1]:

- $r_0 = 1,245 \text{ fm}$
- $a = 0,7 \text{ fm}$
- $V_{so} = 13,492 \text{ MeV}$

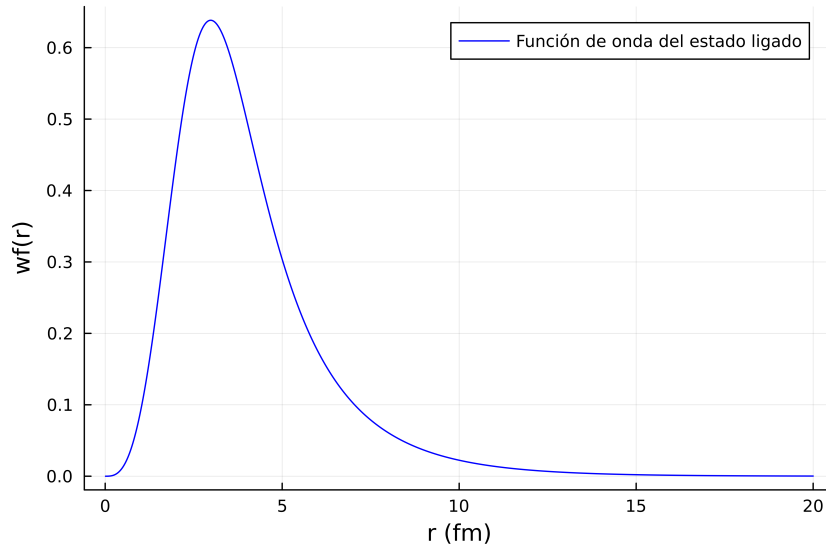


Figura 2.3: Función de onda correspondiente al estado ligado $0d_{5/2}$ del ^{17}O para un valor de $U_0 = 52,827 \text{ MeV}$.

En ambos casos se utilizaron 20 funciones del continuo con energía real para el mismo estado $d_{5/2}$, equiespaciadas en un rango comprendido entre $0 - 50 \text{ MeV}$. El cálculo de dicho estado se debe realizar sobre la posición y la energía como se detalla a continuación partiendo de la ecuación (1.39), donde el subíndice i etiqueta a los estados ligados y j a las resonancias

contenidas entre el contorno P^+ y el semieje real positivo:

$$\begin{aligned}\psi(r) &= \sum_i c_i u_i^{(0)}(r) + \sum_j c_j u_j^{(0)}(r) + \int_{P^+} d\varepsilon c_\varepsilon u^{(0)}(r, \varepsilon) \\ &= \sum_i u_i^{(0)}(r) \int_0^\infty u_i^{(0)}(r) \psi(r) dr + \sum_j u_j^{(0)}(r) \int_0^\infty u_j^{(0)}(r) \psi(r) dr\end{aligned}\quad (2.9)$$

$$\begin{aligned}&+ \int_0^\infty u^{(0)}(r, \varepsilon) \int_0^\infty u^{(0)}(r, \varepsilon) \psi(r) dr d\varepsilon \\ &= \sum_i u_i^{(0)}(r) \int_0^\infty u_i^{(0)}(r) \psi(r) dr + \sum_j u_j^{(0)}(r) \int_0^\infty u_j^{(0)}(r) \psi(r) dr \\ &+ \sum_k u^{(0)}(r, \varepsilon_k) \int_0^\infty u^{(0)}(r, \varepsilon_k) \psi(r) dr \Delta\varepsilon\end{aligned}\quad (2.10)$$

$$\begin{aligned}&= \sum_i u_i^{(0)}(r) \sum_l u_i^{(0)}(r_l) \psi(r_l) \Delta r_l + \sum_j u_j^{(0)}(r) \sum_m u_j^{(0)}(r_m) \psi(r_m) \Delta r_m \\ &+ \sum_k u^{(0)}(r, \varepsilon_k) \sum_n u^{(0)}(r_n, \varepsilon_k) \psi(r_n) \Delta r_n \Delta\varepsilon\end{aligned}\quad (2.11)$$

En el desarrollo anterior se aproximaron las integrales espaciales y de energía por cuadraturas trapezoidales, donde $\Delta r_l = \Delta r_m = \Delta r_n = r_{step}$ y $\Delta\varepsilon$ es la diferencia de energía entre los estados de dispersión. Para este caso los límites de integración r_{max} y E_{max} son 20 fm y 50 MeV respectivamente, que son los valores máximos de distancia y energía para los cuales se realizaron las sumatorias.

Inicialmente, se propuso utilizar $E_{max} = 10$ MeV, pero no se logró una convergencia de la función de onda en la región exterior del núcleo, indistintamente del número de estados de dispersión considerados, por lo que se determinó utilizar $E_{max} = 50$ MeV, esto demuestra que los estados de dispersión de alta energía son necesarios para describir apropiadamente la región de la función de onda más allá del radio nuclear.

2.2.1. Caso $U_0 = 40$ MeV

Utilizando la expansion mostrada en (1.27), se expande el estado ligado sobre la base de Berggren generada por h_0 , donde el potencial de Wood-Saxon posee parámetros iguales a los mencionados al comienzo de esta sección y $U_0 = 40$ MeV. Con dichos valores este Hamiltoniano no posee estados ligados, pero sí una resonancia cercana al eje real con valor $E = (0,80 - i0,046)$ MeV. Como la integración se realizó sobre el eje real, la función de onda aproximada se conforma únicamente por estados de dispersión $u^{(0)}(r, \varepsilon)$, con sus respectivos coeficientes c_ε . Donde $u^{(0)}(r, \varepsilon)$ son los autoestados de $h_0 = T + U_0$.

Para mostrar la representación sobre esta base, se utilizaron 2, 4, 8 y 20 funciones de

dispersión para aproximar la función de onda y ver cómo cambia la misma variando el número de funciones. Las funciones de onda correspondientes se muestran en la figura 2.4

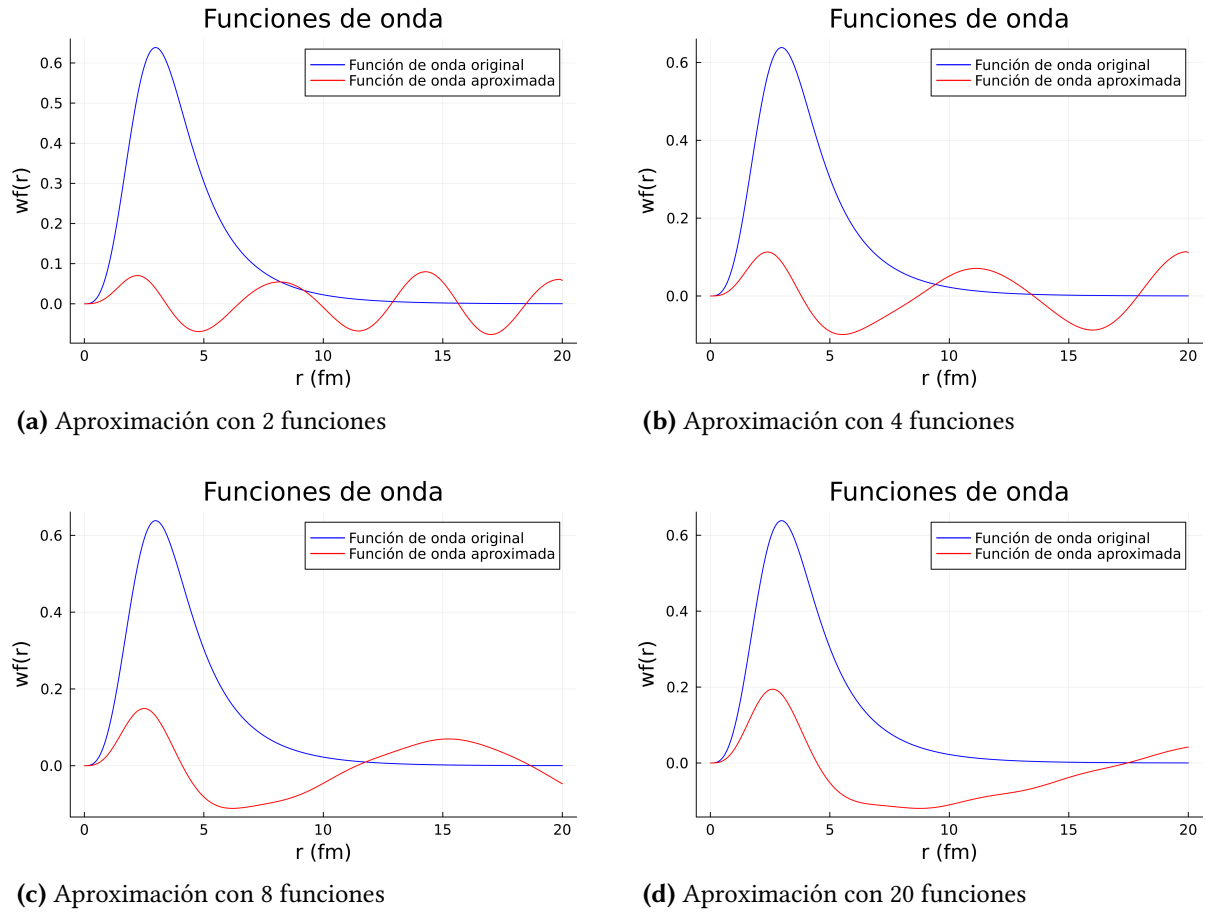


Figura 2.4: Comparación de la función de onda original con distintas aproximaciones para $U_0 = 40$ MeV.

Se observa que no es posible realizar una buena aproximación de la función de onda, debido a la cercanía de la resonancia al eje real de energía. Para salvar la situación es necesario aumentar la cantidad de estados considerados que se encuentran cercanos a la resonancia, como la misma posee un valor de $E_0 = 0,80$ MeV, la densidad de estados en esta región debe ser superior. En la figura 2.5 se utilizaron 1000 estados de dispersión, logrando una aproximación sustancialmente mejor. Para lograr que cualitativamente no se encuentren diferencias de forma visual pueden ser necesarias cantidades mayores de estados; sin embargo, con 1000 se nota una clara mejoría y cómo la función de onda aproximada converge a la original, lo que muestra que la convergencia se encuentra garantizada al aumentar la densidad de estados cuando una resonancia se encuentra cerca del eje real.

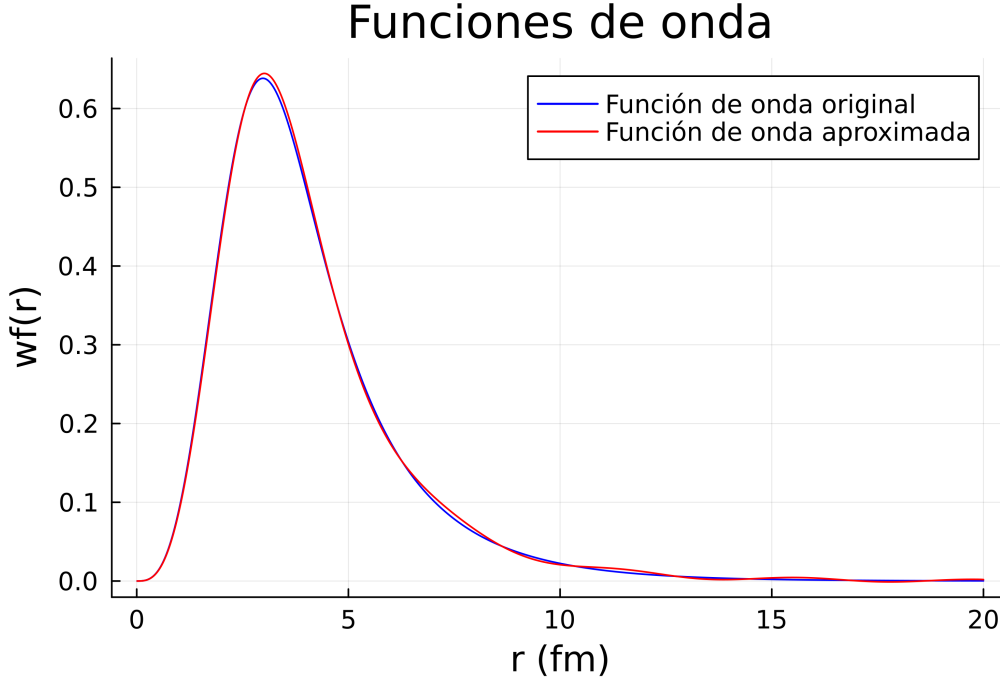


Figura 2.5: Comparación de la función de onda original con una aproximación para $U_0 = 40$ MeV utilizando 1000 estados de dispersión.

Se destaca cómo inicialmente la función de onda converge en la región dentro del núcleo y la mayor densidad de estados asegura el buen comportamiento en la “cola” de la función, donde se observan pequeñas oscilaciones. Esta región concuerda con el espacio que se encuentra por fuera del núcleo.

2.2.2. Caso $U_0 = 25$ MeV

Análogo a la situación anterior, se realizó el mismo procedimiento, cambiando el parámetro del potencial $U_0 = 25$ MeV y manteniendo los restantes iguales. En este caso la resonancia posee una energía compleja igual a $E = (4,03 - i2,04)$ MeV. Como la parte imaginaria es grande (alrededor de tres órdenes de magnitud mayor al caso anterior) la resonancia prácticamente no tiene influencia sobre los estados de dispersión. En la figura 2.6 se muestra como se va construyendo la función de onda expandida a medida que se incrementa el número de estados de dispersión. La energía de corte es 50 MeV, como en el análisis anterior. Se observó que la convergencia, aunque pobre, es más rápida que para la situación donde la resonancia estaba cerca del eje real.

La rapidez mencionada anteriormente permite la utilización de una menor cantidad de funciones para obtener una representación aceptable.

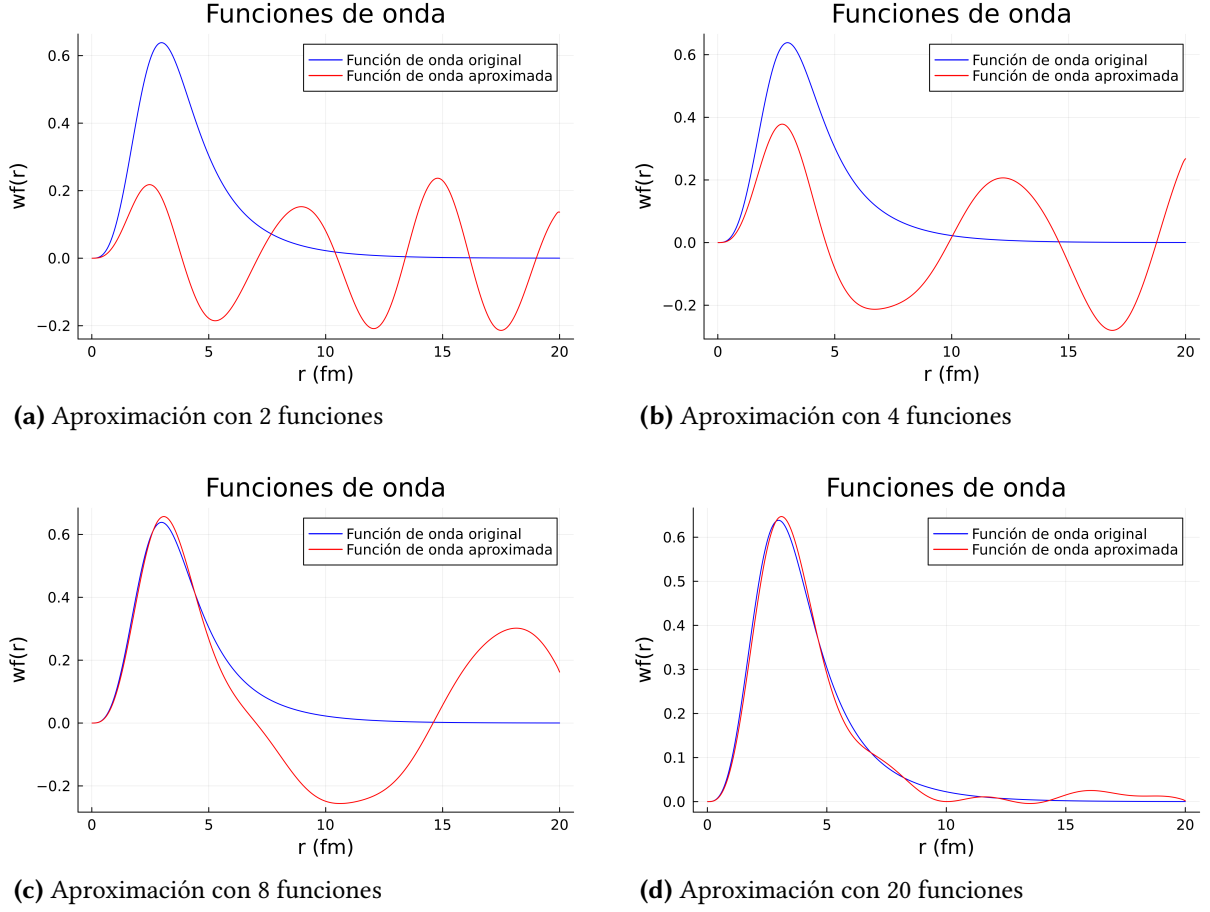


Figura 2.6: Comparación de la función de onda original con distintas aproximaciones para $U_0 = 25 \text{ MeV}$.

De forma análoga al caso anterior se realizó una representación utilizando 100 estados de dispersión, donde de forma visual no es posible distinguir la función de onda original y la aproximada, este caso se muestra en la figura 2.7, evidenciando la convergencia.

Una vez realizado el análisis cualitativo, se procedió a hacer un análisis cuantitativo de las aproximaciones que utilizaron únicamente 20 funciones de dispersión tanto para el potencial con $U_0 = 40 \text{ MeV}$ como el caso con $U_0 = 25 \text{ MeV}$. El mismo se realizó calculando la desviación cuadrática media (χ^2) para ambas expansiones, definiendo a $\psi(r)$ como la función del estado ligado y $\psi_{aprox}(r)$ como la función aproximada por estados de dispersión. La definición de dicho valor se detalla en la ecuación (2.12).

$$\chi^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\psi(r_i) - \psi_{aprox}(r_i))^2 \quad (2.12)$$

Como las funciones de onda se encuentran discretizadas en r , N es la cantidad de puntos de la función de onda en la coordenada radial, que en este caso debido a que $r_{max} = 20 \text{ fm}$ y $r_{step} = 0,01 \text{ fm}$, $N = \frac{r_{max}}{r_{step}} = 2000$. Luego $\psi(r), \psi_{aprox}(r)$ son las funciones de onda correspondientes

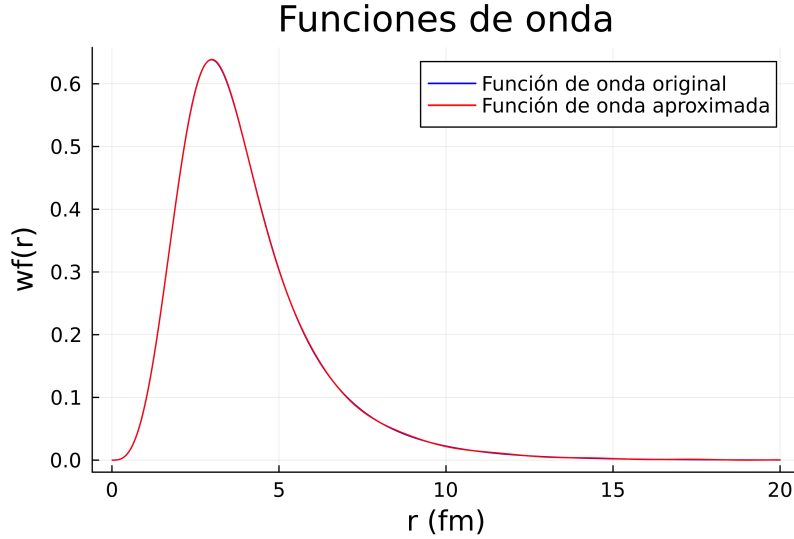


Figura 2.7: Comparación de la función de onda original con una aproximación para $U_0 = 25 \text{ MeV}$ utilizando 100 estados de dispersión.

al estado ligado original y a la representación utilizando los estados de la base de Berggren respectivamente.

En el caso de $U_0 = 40 \text{ MeV}$ se obtuvo un valor de $\chi^2 = 2 \cdot 10^{-2}$, mientras que para $U_0 = 25 \text{ MeV}$ el valor fue de $\chi^2 = 7 \cdot 10^{-7}$. El valor obtenido para 40 MeV es cinco órdenes mayor que el de 25 MeV . Esta dificultad para lograr una correcta aproximación con un número de funciones de onda razonable marca la necesidad de realizar la misma utilizando contornos de integración complejos que incluyan dentro a las resonancias que aportan información valiosa en la aproximación.

2.3. Expansión del estado ligado $0d_{5/2}$ de ^{17}O en base compleja

De forma alternativa a la representación real es posible utilizar una que incluya explícitamente la resonancia y un número finito de estados de dispersión con energía compleja. El contorno complejo se define a partir de los valores E_0 y $\frac{\Gamma}{2}$ de la resonancia del Hamiltoniano auxiliar h_0 que es quien define la base. Esta resonancia debe ser contenida por el contorno de integración, lo que divide al mismo en cuatro segmentos. El primer (C_1) posee los siguientes puntos como vértices $(0, 0)$ y $(0.02 \cdot E_0, 0)$. El segundo segmento (C_2) comienza en el punto $(0.02 \cdot E_0, 0)$ y finaliza $(E_0, -\frac{\Gamma}{2} - 1.5)$, donde el valor 1.5 se define para contener la resonancia de forma correcta dentro del contorno, alejándolo 1.5 MeV de la misma. El tercer segmento (C_3) tiene vértices $(E_0, -\frac{\Gamma}{2} - 1.5)$ y $(1.98 \cdot E_0, 0)$. Y finalmente el cuarto (C_4) comienza en

$(1,98 \cdot E_0, 0)$ y finaliza $(E_{max}, 0)$. En la figura 2.8 se muestra la forma del contorno a modo de ejemplo, sin utilizar valores particulares.

Para realizar la integración es necesario redefinir la misma, ya que al integrar por distintos segmentos es necesario definir la diferencia de energía entre los estados y la variación sobre el plano complejo, lo que se evidencia en la ecuación (2.13).

Aquí $\Delta z_i = E_{i+1} - E_i$, con E_i sobre el contorno y se corresponde con el peso de la cuadratura trapezoidal, mientras $|\Delta E| = |\Delta z_i|$, el cual es el mismo para todos los estados sobre el contorno.

$$|u_i\rangle = \sqrt{\Delta z_i |\Delta E|} |u_i^0\rangle, \quad (2.13)$$

donde $|u_i^0\rangle$ es el estado de dispersión discretizado sobre el contorno, y es autofunción de h_0 .

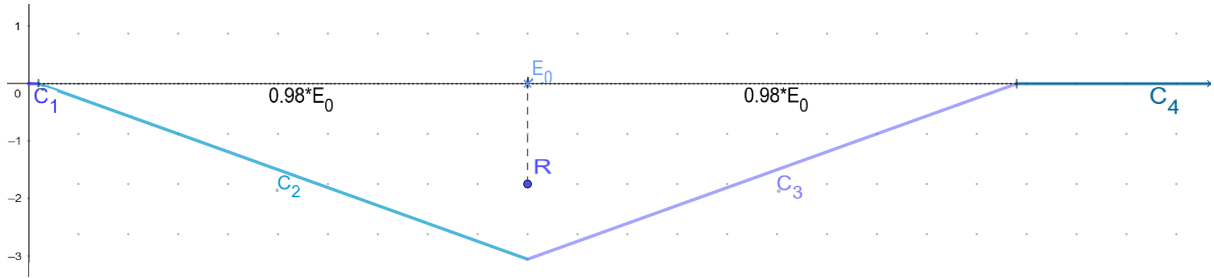


Figura 2.8: Contorno de integración complejo.

La definición de $1,5 \text{ MeV}$ se consideró razonable porque permite alejar el contorno a una distancia prudencial de la resonancia sin que el mismo se encuentre demasiado lejos. Se probó con un valor de $2,5 \text{ MeV}$ y la parte imaginaria de la función de onda aumentaba considerablemente, lo que es indicio de que no es una buena opción tomar estados de dispersión con parte imaginaria muy grande.

Para calcular la función de onda sobre la base compleja como se muestra en la ecuación (1.23), ahora que el contorno encierra una resonancia entre el mismo y el semieje real de energía, dicha resonancia es parte de la base y su función debe ser considerada en el cálculo. La aproximación se realizó nuevamente para $U_0 = 40 \text{ MeV}$, debido a que utilizando la integración real, fue el caso con peores resultados. Para esto se integró sobre el contorno complejo utilizando 1 función sobre C_1 , 2 funciones para C_2 y C_3 ; y 15 funciones para C_4 . De esta forma la cantidad de funciones es igual al primer caso, aunque el valor de obtenido de $\chi^2 = 7 \cdot 10^{-3}$ lo que representa una disminución de un orden de magnitud respecto al valor obtenido anteriormente.

De la misma forma que se mostró en la sección anterior, en la figura 2.9 se muestra como ocurre la convergencia para 2, 4, 8 y 20 funciones utilizando integración compleja.

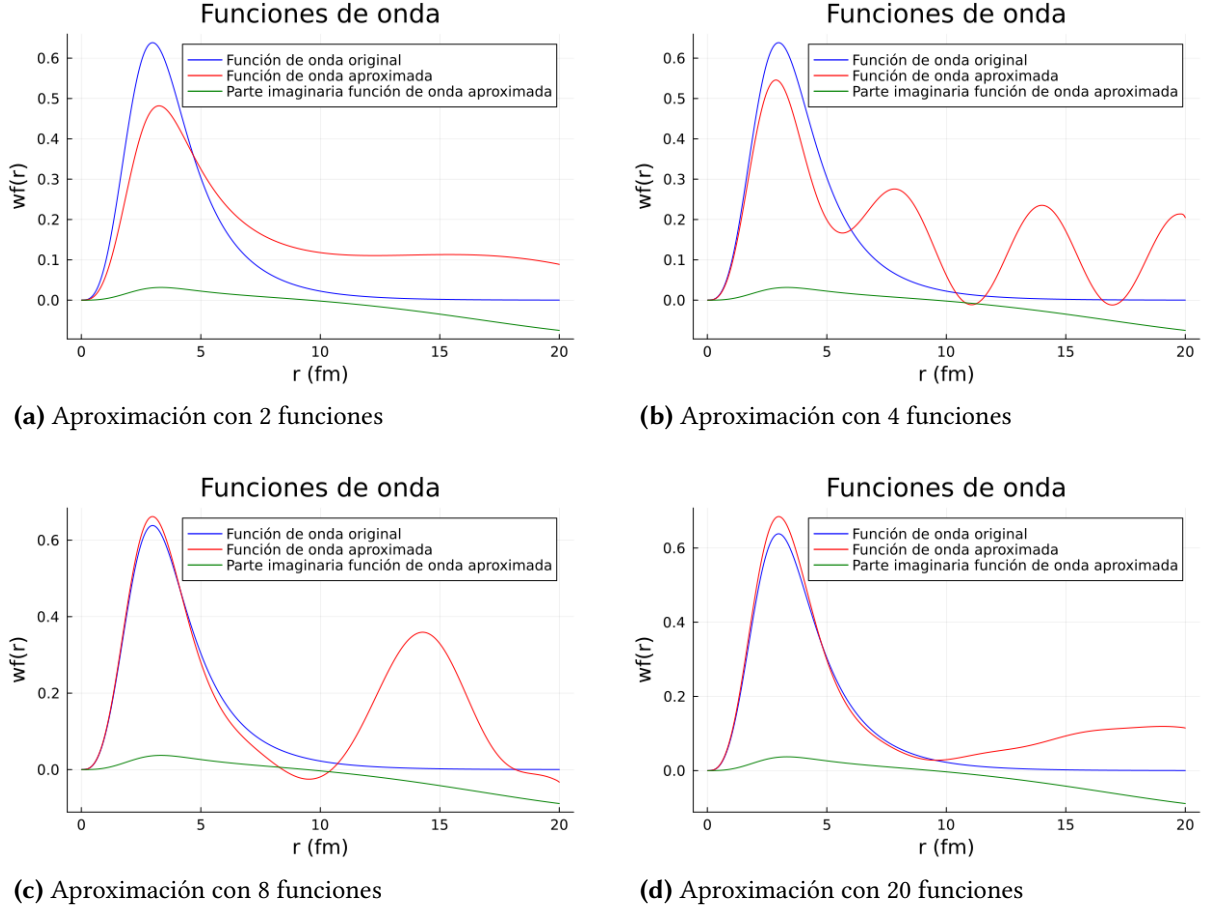


Figura 2.9: Comparación de la función de onda original con distintas aproximaciones para $U_0 = 40 \text{ MeV}$ utilizando integración compleja.

Es posible observar la mejora en la convergencia para una cantidad baja de funciones (2 y 4), donde vemos una mejor aproximación en comparación al caso de $U_0 = 40 \text{ MeV}$ con base real. Esta mejora es debido a la incorporación de forma explícita de la resonancia, la cual aporta valiosa información en la representación, lo que permite utilizar una menor cantidad de funciones para obtener un valor del mismo orden o menor de χ^2 .

La componente imaginaria es espuria debido a que aún no se ha alcanzado la convergencia. La figura 2.10 muestra la función expandida en la base compleja utilizando 1 función sobre C_1 , 1 función para C_2 y C_3 ; y 20 funciones para C_4 , manteniendo el valor de $U_0 = 40 \text{ MeV}$.

2.4. Análisis de convergencia

En las secciones anteriores se obtuvo convergencia con 100 estados de dispersión para una onda parcial. En cálculos de sistemas de muchos cuerpos se hace uso de decenas de ondas

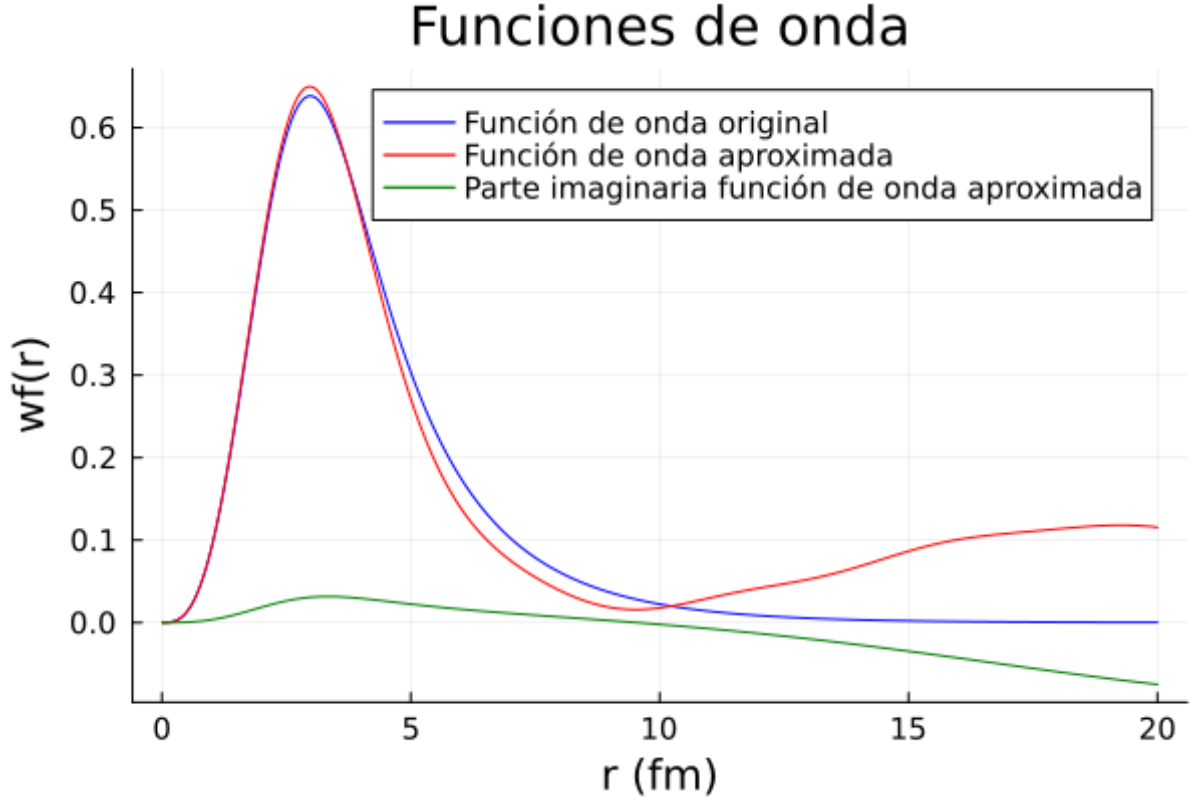


Figura 2.10: Comparación de la función de onda original con una aproximación para $U_0 = 40 \text{ MeV}$ utilizando 23 estados de dispersión sobre un contorno complejo.

parciales y múltiples contracciones entre ellas. Por este motivo es importante reducir el número de estados de dispersión necesario para describir el continuo.

2.4.1. Sobre la cuadratura para aproximar integrales en energía

Al consultar información sobre métodos de cuadratura para el caso de energía, se presenta la cuadratura de Gauss-Legendre (G-L), utilizada extensamente en la bibliografía disponible [6]. Debido a esto se optó por analizar, en esta sección, el rendimiento entre las dos cuadraturas, G-L y trapezoidal.

En el caso de G-L la integración en energía de los estados de dispersión se aproxima de la siguiente manera:

$$\int_0^\infty |u_\varepsilon\rangle \langle u_\varepsilon|\psi\rangle d\varepsilon \approx \sum_k |u_{\varepsilon_k}\rangle \langle u_{\varepsilon_k}|\psi\rangle h_k \quad (2.14)$$

$$\approx \sum_k \sqrt{h_k} |u_{\varepsilon_k}\rangle \sqrt{h_k} \langle u_{\varepsilon_k}|\mathbb{1}|\psi\rangle \quad (2.15)$$

$$\approx \sum_k |w_{\varepsilon_k}\rangle \int \langle w_{\varepsilon_k}|r\rangle \langle r|\psi\rangle dr \quad (2.16)$$

$$\approx \sum_k |w_{\varepsilon_k}\rangle \sum_n w_{\varepsilon_k}(r_n) \psi(r_n) \Delta r_n, \quad (2.17)$$

donde h_k son los pesos de Gauss-Legendre para cada energía y w_{ε_k} las funciones de dispersión para la energía que corresponde a los ceros de los polinomios de Legendre, multiplicadas por la raíz cuadrada del peso: $w_{\varepsilon_k} = \sqrt{h_k} u_{\varepsilon_k}$.

Ya definido el marco teórico se procedió a realizar el código para proyectar el estado ligado sobre la base anteriormente mencionada (40 MeV) debido a que para el eje real es el caso más desfavorable, donde la resonancia se encuentra cercana al mismo. Se observó que el código funciona correctamente y era posible utilizar la cuadratura sobre el eje real de energía, vale notar que valores demasiado pequeños de E_{max} no permiten reconstruir correctamente la función de onda. Antes de realizar una comparación entre ambas cuadraturas en la representación de Berggren con el contorno introducido en la sección anterior, se comprobó que tanto la cuadratura G-L como la trapezoidal logran que la parte imaginaria de la función de onda aproximada sea prácticamente nula al utilizar el contorno complejo. En ambos casos se verificó que es correcto, por lo que se prosiguió a utilizar un caso de prueba para analizar la convergencia de ambos métodos.

El análisis de convergencia se realizó primeramente sobre el eje real, considerando 4 segmentos que coinciden con las divisiones en la parte real de la figura 2.8, para esto se eligió $E_{max} = 1000 \text{ MeV}$ y la cantidad de funciones para C_2 , C_3 y C_4 :

- Cantidad de funciones para C_2 (n_2): 8 funciones
- Cantidad de funciones para C_3 (n_3): 8 funciones
- Cantidad de funciones para C_4 (n_4): 100 funciones

El límite de energía se determinó para contemplar un espacio más completo, debido a que a priori, restringir $E_{max} = 100 \text{ MeV}$ podía limitar la convergencia. Luego se comenzó a aumentar la cantidad de funciones en el segmento C_1 en potencias de 2 y se registró el valor de χ^2 (2.12) para cada valor de n_1 . Una vez que χ^2 no varía al aumentar n_1 se procede a variar de igual forma n_2 y n_3 , estos utilizan el mismo valor porque, como el contorno es simétrico entre los dos segmentos, se optó por respetar dicha simetría y utilizar la misma cantidad de funciones a cada lado de la resonancia. Esta simetría cobra importancia al utilizar valores complejos.

En la tabla 2.1 se muestran los valores obtenidos, resaltando en color cuando se consideró la saturación de cada contorno. Análogamente se realizó el mismo tratamiento para la cuadratura de Gauss-Legendre, como se muestra en la tabla 2.2

Cantidad funciones	χ^2		
	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	$6,17 \cdot 10^{-3}$	0.17	$6,78 \cdot 10^{-3}$
4	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$2,25 \cdot 10^{-2}$	$6,78 \cdot 10^{-3}$
8	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$6,78 \cdot 10^{-3}$
16	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$5,58 \cdot 10^{-3}$	$6,83 \cdot 10^{-3}$
32	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$5,61 \cdot 10^{-3}$	$7,26 \cdot 10^{-3}$
64	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$5,62 \cdot 10^{-3}$	$6,89 \cdot 10^{-3}$
128	$6,17 \cdot 10^{-3}$	$5,63 \cdot 10^{-3}$	$5,20 \cdot 10^{-3}$
256			$2,44 \cdot 10^{-3}$
512			$9,41 \cdot 10^{-4}$
1024			$2,97 \cdot 10^{-4}$

Tabla 2.1: Convergencia de χ^2 para los segmentos del eje real utilizando cuadratura trapezoidal

Cantidad funciones	χ^2		
	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	$1,49 \cdot 10^{-6}$	0.014	$6,80 \cdot 10^{-3}$
4	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$5,31 \cdot 10^{-5}$	$7,10 \cdot 10^{-3}$
8	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$1,77 \cdot 10^{-2}$
16	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$1,21 \cdot 10^{-10}$	$1,12 \cdot 10^{-2}$
32	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$7,26 \cdot 10^{-11}$	$4,32 \cdot 10^{-4}$
64	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$7,26 \cdot 10^{-11}$	$1,09 \cdot 10^{-8}$
128	$1,49 \cdot 10^{-6}$	$7,26 \cdot 10^{-11}$	$6,97 \cdot 10^{-11}$
256			$6,98 \cdot 10^{-11}$
512			$6,98 \cdot 10^{-11}$
1024			$6,98 \cdot 10^{-11}$

Tabla 2.2: Convergencia de χ^2 para los segmentos del eje real utilizando cuadratura G-L

Se observa que, en la tabla 2.1 χ^2 decrece para 1024 funciones en C_4 , sin embargo, se tomó este valor como límite porque aumentar n_4 resulta impráctico y la finalidad de este trabajo es reducir el número de funciones sobre las que se proyecta la función original.

De forma análoga en la tabla 2.2 G-L logra valores de χ^2 con 7 órdenes de magnitud menores a la cuadratura trapezoidal por lo que es un método más efectivo, a su vez, se remarcó que no solo la aproximación es mejor, sino que también se utilizó una menor cantidad de funciones (194 vs. 1058).

La diferencia en la convergencia de ambos métodos se muestra en la figura 2.11, donde es posible observar que utilizando alrededor de 16 funciones, G-L es superior a la cuadratura trapezoidal. Dicha figura se realizó con los datos correspondientes a la convergencia del segmento C_4 de ambas cuadraturas.

2.4.2. Aplicación al contorno complejo

A continuación se analizó la convergencia y saturación de funciones sobre el contorno complejo utilizando los valores de potencial mencionados anteriormente (25 MeV , 40 MeV) para analizar el comportamiento de las mismas contemplando la resonancia y prescindiendo de ella. En la tabla 2.3 se observa la convergencia para un valor de potencial $U_0 = 40$ MeV utilizando la cuadratura trapezoidal. Recordar que χ^2 mide la diferencia entre el estado ligado que es autofunción de h , calculado de forma exacta con el código ANTI y la función calculada aproximadamente mediante la expansión en la base que incluye un estado ligado, o de resonancia, según corresponda y los estados de dispersión.

Luego el mismo análisis se realizó para el mismo valor de potencial pero esta vez utilizando la cuadratura de Gauss-Legendre. Los valores obtenidos se muestran en la tabla 2.4.

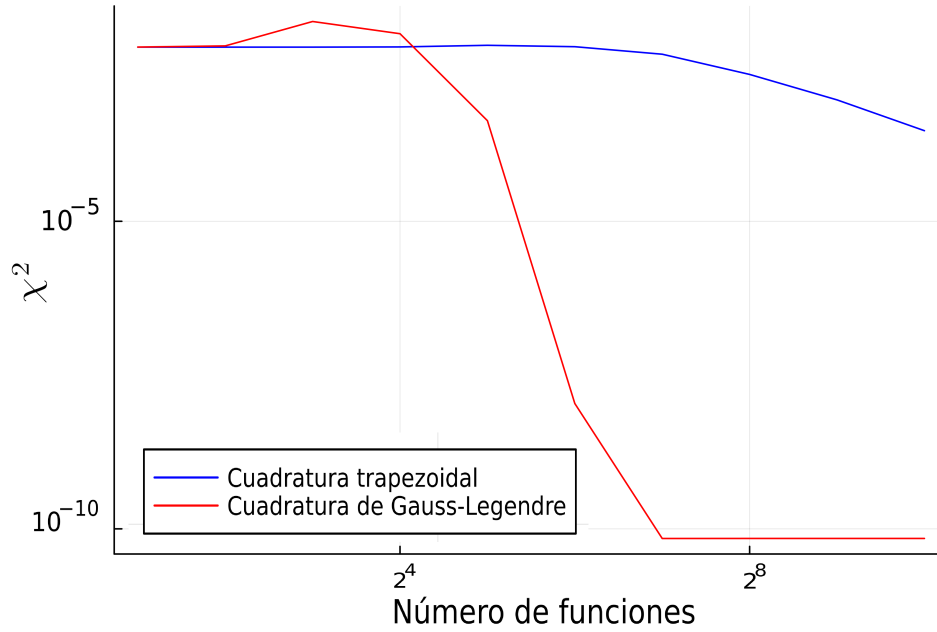


Figura 2.11: Convergencia entre cuadratura trapezoidal y de Gauss-Legendre variando la cantidad de funciones en C_4 .

El contorno definido para esta resonancia, que tiene energía $(0,798 - i0,046)$ MeV, resulta determinado por sus cuatro vértices que son $(0,0 - i0,0)$ MeV, $(0,016 - i0,0)$ MeV, $(0,798, -i1,046)$ MeV, $(1,58 - i0,0)$ MeV y $(100 - i0,0)$ MeV.

Cantidad funciones	χ^2		
	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$9,62 \cdot 10^{-3}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$
4	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$1,53 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$
8	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$
16	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$3,75 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$
32	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$6,09 \cdot 10^{-2}$	$1,00 \cdot 10^{-2}$
64	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-1}$	$9,91 \cdot 10^{-3}$
128	$2,39 \cdot 10^{-2}$	$1,79 \cdot 10^{-1}$	$9,39 \cdot 10^{-3}$
256			$8,34 \cdot 10^{-3}$
512			$5,91 \cdot 10^{-3}$
1024			$2,96 \cdot 10^{-3}$

Tabla 2.3: Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura trapezoidal ($U_0 = 40$ MeV)

Cantidad funciones	χ^2		
	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,29 \cdot 10^{-3}$	$2,11 \cdot 10^{-2}$
4	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$2,15 \cdot 10^{-2}$
8	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$2,98 \cdot 10^{-2}$
16	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$2,93 \cdot 10^{-2}$
32	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$7,50 \cdot 10^{-3}$
64	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,04 \cdot 10^{-3}$
128	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$	$9,03 \cdot 10^{-3}$
256			$9,03 \cdot 10^{-3}$
512			$9,03 \cdot 10^{-3}$
1024			$9,03 \cdot 10^{-3}$

Tabla 2.4: Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre ($U_0 = 40$ MeV)

Se observó que utilizando el contorno complejo, ambos métodos ofrecen peores resultados comparados a utilizar el eje real, sin embargo, vemos que el método de Gauss-Legendre requiere menos funciones sobre los segmentos complejos para poder converger la función de onda.

Además, se aprecia una mayor estabilidad en los valores de χ^2 al continuar aumentando el número de funciones en contraposición de la cuadratura trapezoidal, donde es posible ver que para los segmentos $C_2 - C_3$ si se continúa agregando funciones la reconstrucción de la función de onda se ve afectada negativamente.

Es posible que la pobre convergencia sea debido a que la resonancia $E = (0,798 - i0,046)$ que forma la base es muy ancha, y por ende los estados de dispersión tienen una componente imaginaria muy grande. Las componentes imaginarias introducidas por la resonancia deben ser compensadas por los estados de dispersión con energía compleja, dado que ese estado expandido es puramente real (sin componente imaginaria). Para analizar si estos resultados dependen de la resonancia o solamente de utilizar el contorno complejo, se procedió a realizar el análisis para un valor de potencial de $U_0 = 25 \text{ MeV}$, los resultados de las dos cuadraturas se muestran en las tablas 2.5 y 2.6, para este caso la resonancia tiene un valor de $E = (4,03 - i2,04) \text{ MeV}$ con la cual los vértices del contorno resultan: $(0,0 - i0,0) \text{ MeV}$, $(0,08 - i0,0) \text{ MeV}$, $(4,03 - i3,046) \text{ MeV}$, $(7,98 - i0,0) \text{ MeV}$ y $(100 - i0,0) \text{ MeV}$.

	χ^2		
Cantidad funciones	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	$9,21 \cdot 10^{-2}$	$1,06 \cdot 10^{-1}$	$9,79 \cdot 10^{-2}$
4	$9,22 \cdot 10^{-2}$	$8,05 \cdot 10^{-2}$	$9,78 \cdot 10^{-2}$
8	$9,22 \cdot 10^{-2}$	$9,21 \cdot 10^{-2}$	$9,72 \cdot 10^{-2}$
16	$9,22 \cdot 10^{-2}$	$1,46 \cdot 10^{-1}$	$9,42 \cdot 10^{-2}$
32	$9,23 \cdot 10^{-2}$	$2,71 \cdot 10^{-1}$	$8,89 \cdot 10^{-2}$
64	$9,24 \cdot 10^{-2}$	$5,40 \cdot 10^{-1}$	$8,27 \cdot 10^{-2}$
128	$9,27 \cdot 10^{-2}$	1,10	$8,22 \cdot 10^{-2}$
256			$1,27 \cdot 10^{-1}$
512			$4,02 \cdot 10^{-1}$
1024			1,69

Tabla 2.5: Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura trapezoidal ($U_0 = 25 \text{ MeV}$)

	χ^2		
Cantidad funciones	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	1,18	1,03	1,13
4	1,18	1,18	1,13
8	1,18	1,18	1,02
16	1,18	1,18	1,03
32	1,18	1,18	1,03
64	1,18	1,18	1,03
128	1,18	1,18	1,03
256			1,03
512			1,03
1024			1,03

Tabla 2.6: Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre ($U_0 = 25 \text{ MeV}$)

Cuando $U_0 = 25 \text{ MeV}$, la resonancia contenida en el contorno de integración se encuentra demasiado metida en el plano complejo (2 MeV) lo que implica peores aproximaciones de la función de onda, en este caso ambas cuadraturas obtienen peores resultados que cuando la resonancia se encuentra cerca del eje real (caso $U_0 = 40 \text{ MeV}$), sin embargo, G-L obtiene peores resultados aunque una mayor estabilidad en los valores de χ^2 cuando aumenta el número de funciones sobre cada segmento.

Un problema que se observó es que en el caso de la resonancia mas angosta ($U_0 = 40 \text{ MeV}$) la aproximación tiene un χ^2 dos órdenes de magnitud menos, se planteó entonces que este mejor desempeño puede ser debido a que, dicha resonancia es más angosta que en el caso de $U_0 = 25 \text{ MeV}$, lo que mejora la convergencia de la “cola” de la función. Para confirmar si este era el problema se probó utilizar un valor de potencial de $U_0 = 42,5 \text{ MeV}$, para la base creada con ese valor existe una resonancia más angosta que tiene un valor de $\frac{\Gamma}{2} = 3,55 \cdot 10^{-5} \text{ MeV}$ y $E_0 = 4,14 \cdot 10^{-2} \text{ MeV}$. Con esta resonancia el contorno tiene como vértices los siguientes puntos: $(0,0 - i0,0) \text{ MeV}$, $(0,0008 - i0,0) \text{ MeV}$, $(4,14 \cdot 10^{-2} - i1,00004 \text{ MeV}$, $(0,082 - i0,0) \text{ MeV}$ y $(100 - i0,0) \text{ MeV}$ Los resultados obtenidos se muestran en la tabla 2.7.

Cantidad funciones	χ^2		
	C_1	$C_2 - C_3$	C_4
2	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,45 \cdot 10^{-7}$	$4,31 \cdot 10^{-3}$
4	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,49 \cdot 10^{-7}$	$4,48 \cdot 10^{-3}$
8	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$1,19 \cdot 10^{-2}$
16	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$1,08 \cdot 10^{-2}$
32	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,38 \cdot 10^{-3}$
64	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$5,23 \cdot 10^{-7}$
128	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,51 \cdot 10^{-7}$	$2,12 \cdot 10^{-7}$
256			$1,77 \cdot 10^{-7}$
512			$1,75 \cdot 10^{-7}$
1024			$1,75 \cdot 10^{-7}$

Tabla 2.7: Convergencia de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre

Se mostró que es posible obtener una buena aproximación utilizando G-L, en este caso se determinó que $n_4 = 64$ es una buena alternativa porque para los siguientes incrementos la variación en χ^2 es mínima.

La utilización de Gauss-Legendre es favorable en casos donde la resonancia es angosta, si se comparan los mejores resultados obtenidos para los tres valores de potencial se ve la mejoría en la representación mientras más angosta es la resonancia, esto se muestra en la tabla 2.8

	$U_0 = 25 \text{ MeV}$	$U_0 = 40 \text{ MeV}$	$U_0 = 42,5 \text{ MeV}$
Ancho de la resonancia	$2,04 \text{ MeV}$	$4,60 \cdot 10^{-2}$	$3,55 \cdot 10^{-5} \text{ MeV}$
Mejor aproximación (χ^2)	1,02	$7,50 \cdot 10^{-3}$	$5,23 \cdot 10^{-7}$

Tabla 2.8: Comparativa de χ^2 en el contorno complejo utilizando cuadratura de Gauss-Legendre para distintos potenciales

Es evidente como si el ancho de la resonancia disminuye 5 órdenes de magnitud, χ^2 disminuye

7. Esto indica que mientras más angosta sea la resonancia, la mejoría en la aproximación es todavía mayor.

Para ejemplificar la distribución de funciones cuando se utiliza G-L se graficaron los valores de energía compleja utilizados sobre el contorno C_2 y C_3 , que se muestra en la figura 2.12, donde se observa que G-L tiene la característica de tener una mayor densidad de puntos en los extremos del intervalo.

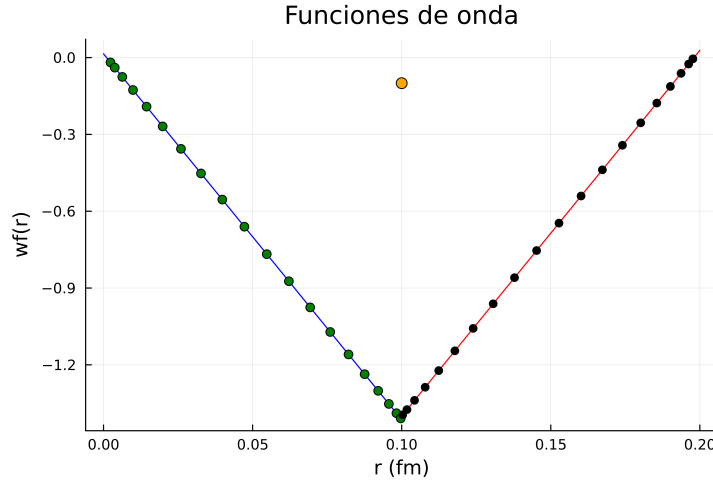


Figura 2.12: Distribución de funciones para cuadratura G-L sobre C_2 y C_3 .

Finalmente, se concluyó que entre los métodos de cuadratura mencionados, el de Gauss-Legendre presenta una mayor estabilidad, mejor desempeño y un menor costo computacional, por lo que durante el resto de este trabajo será la cuadratura utilizada.

2.5. Expansión de estados para ^{208}Pb

El primer uso de la representación de Berggren en un sistema realista fue en el área de física nuclear [11]. Los autores de la Ref. [11] diagonalizaron un Hamiltoniano de partícula simple en la base de Berggren. En su estudio solo se ocuparon en calcular el autovalor del Hamiltoniano expandido en la base construida con el Hamiltoniano auxiliar. Este trabajo se ocupa de analizar el uso de la Base de Berggren para expandir las autofunciones.

Al haber analizado los métodos de cuadratura y haber obtenido una buena representación del estado ligado de ^{17}O , se eligió representar estados que resulten más realistas en cuanto a su inestabilidad, para esto se utilizó como referencia un trabajo sobre el ^{208}Pb [11]. En dicho trabajo se expanden dos estados correspondientes al nivel $h_{11/2}$, uno ligado y otro resonante, con energías $E = -14,88 \text{ MeV}$ y $(2,33, -0,030) \text{ MeV}$ respectivamente.

Los parámetros utilizados para calcular las funciones de onda correspondientes fueron presentados en el trabajo mencionado junto con [4], donde se explicita el valor del potencial de espín-órbita. A Continuación se detallan los valores que definen el Hamiltoniano h del sistema.

- $U_0 = 44,4 \text{ MeV}$
- $a = 0,7 \text{ fm}$
- $r_0 = 1,27$
- $V_{so} = 16,5 \text{ MeV}$

Luego de obtener las funciones de onda del estado ligado y resonante con los parámetros listados se procede a definir el Hamiltoniano auxiliar h_0 que va a generar la base para expandir estos estados, se tomó $U_0 = 40,4 \text{ MeV}$ y $a = 0,6 \text{ fm}$ con el mismo número cuántico $h_{11/2}$. Con estos parámetros de campo medio se definió el contorno de integración mediante el cual se van a representar el estado ligado y la resonancia de h . Siguiendo la Ref. [11] se definió un contorno en el espacio k con los siguientes vértices: (0,0), (0.4, -0.1), (0.6,0) y (4,0). El contorno está elegido de modo que la base generada por el potencial auxiliar h_0 descubra la región de la segunda hoja de Riemann donde se encuentra la resonancia del Hamiltoniano h del sistema.

Estos vértices corresponden a los siguientes valores en energía (0,0), (3.12,-1.67), (7.50,0) y (333.17,0) MeV , donde se usó la relación de dispersión $\epsilon = \frac{k^2}{c_1}$, con $c_1 = \frac{\mu}{\hbar^2} = 0,048024 \frac{1}{\text{MeV fm}^2}$, donde μ es la masa reducida del sistema neutrón- ^{208}Pb .

En esta base continúa existiendo un estado ligado con $E = -12,45 \text{ MeV}$ y una resonancia con $(E_0 = 4,39, \frac{\Gamma}{2} = -0,34) \text{ MeV}$ que se encuentra contenida por el contorno. Con los estados mencionados se realizó la expansión sobre la base respetando la cantidad de funciones, es decir, potencias de 2 hasta llegar a 128 funciones por segmento de contorno junto con las energías correspondientes, obteniendo la tabla 2.9 con los resultados tanto para el estado ligado como para el de resonancia. El estado ligado se expandió utilizando los estados de dispersión del contorno junto con la resonancia y el estado ligado que pertenecen a la base creada por h_0 .

	Ligado		Resonancia	
Cantidad de funciones por segmento	χ^2	E	χ^2	E
0	$4,22 \cdot 10^{-5}$	$-12,517 \text{ MeV}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$	$(4,405, -0,133) \text{ MeV}$
2	$9,90 \cdot 10^{-5}$	$-12,527 \text{ MeV}$	$5,05 \cdot 10^{-2}$	$(4,081, -0,275) \text{ MeV}$
4	$1,24 \cdot 10^{-4}$	$-12,525 \text{ MeV}$	$4,71 \cdot 10^{-2}$	$(4,237, -0,283) \text{ MeV}$
8	$1,46 \cdot 10^{-4}$	$-12,526 \text{ MeV}$	$4,67 \cdot 10^{-2}$	$(4,305, -0,314) \text{ MeV}$
16	$7,67 \cdot 10^{-5}$	$-12,526 \text{ MeV}$	$3,68 \cdot 10^{-2}$	$(4,319, -0,320) \text{ MeV}$
32	$7,10 \cdot 10^{-5}$	$-12,526 \text{ MeV}$	$3,73 \cdot 10^{-2}$	$(4,321, -0,321) \text{ MeV}$
64	$7,10 \cdot 10^{-5}$	$-12,526 \text{ MeV}$	$3,75 \cdot 10^{-2}$	$(4,321, -0,321) \text{ MeV}$
128	$7,10 \cdot 10^{-5}$	$-12,526 \text{ MeV}$	$3,75 \cdot 10^{-2}$	$(4,321, -0,321) \text{ MeV}$

Tabla 2.9: Convergencia de χ^2 para los estados ligado y resonancia del ^{208}Pb

En el trabajo que se utiliza como punto de partida, los autores solo analizan la convergencia de las energías para los estados elegidos. Sin embargo, al comparar la situación se observa que para ellos la energía converge con aproximadamente 16 y 32 funciones por segmento, aunque cuando se analiza la convergencia de la función de onda se nota que el estado ligado requiere 32 funciones y el estado resonante nunca logra una buena aproximación. Esto muestra un dato curioso: es posible obtener valores de energía correctos aunque las funciones de onda sean incorrectas. En la figura 2.13 se observan las aproximaciones para los dos estados cuando ya las funciones de onda convergieron y también sin utilizar estados de dispersión.

Una consideración a tener en cuenta es la buena aproximación que se obtuvo sobre todo en el estado ligado considerando que se utilizó un número considerable de funciones sobre el contorno complejo, las cuales aportan muchas contribuciones imaginarias que deben ser compensadas entre ambos segmentos complejos.

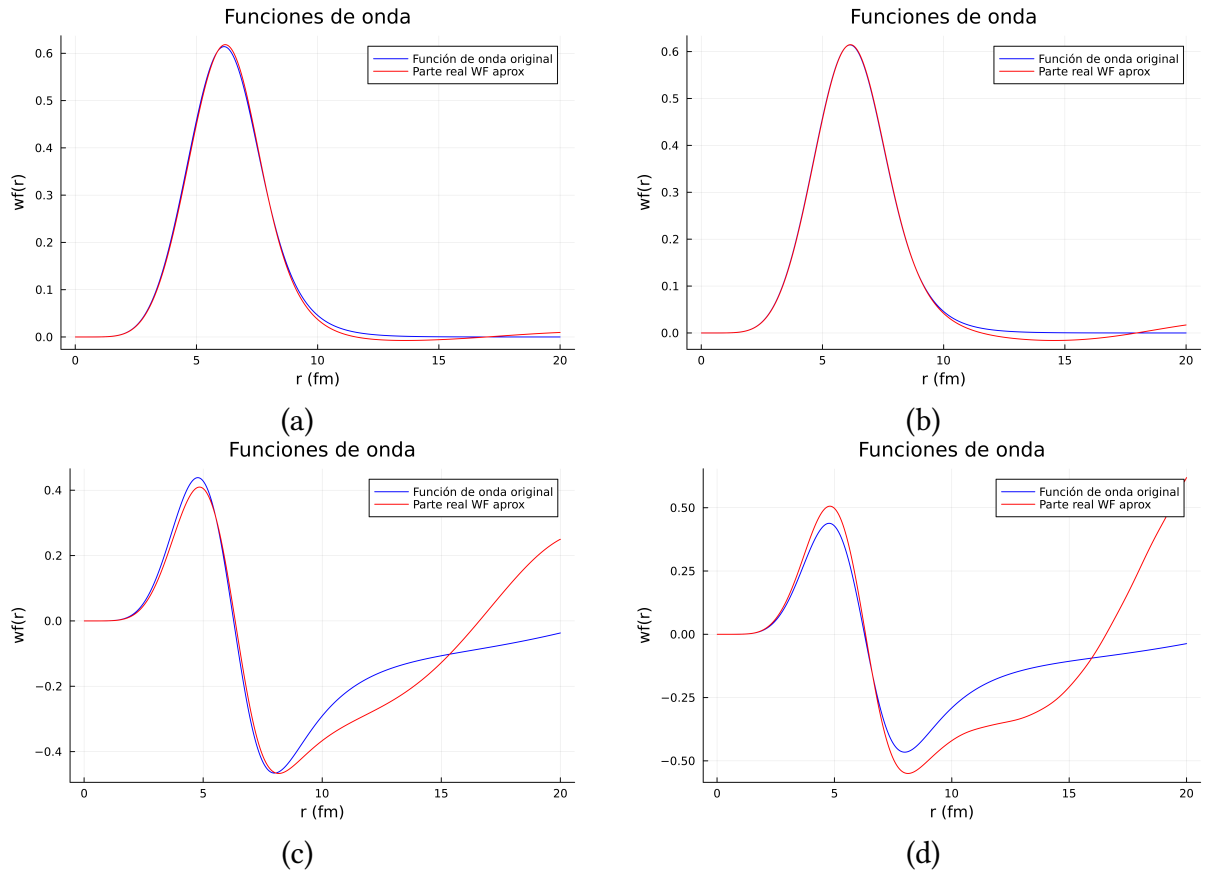


Figura 2.13: Representación del estado ligado sin funciones de dispersión (a) y con la mejor aproximación obtenida (b); además la aproximación del estado resonante sin funciones de dispersión (c) y con la mejor aproximación obtenida (d). Todos correspondientes al nivel $0h_{11/2}$ del ^{208}Pb con la base generada por el Hamiltoniano auxiliar h_0 .

Con esta figura observamos que la función de onda correspondiente al estado ligado realiza

una buena representación particularmente correcta dentro del radio del núcleo ($\approx 10 fm$) y con leves discrepancias fuera del mismo. La tabla 2.9 muestra que calcular autoenergías en bases es mucho menos laborioso computacionalmente que calcular los autovalores, por ejemplo, puede verse que con 8 estados de dispersión, la energía queda bien descrita mientras la función de onda aún no convergió.

Respecto de la representación del estado resonante no solo es peor para describir la probabilidad dentro del núcleo, sino que presenta un aumento considerable alrededor de los $20 fm$, que dispara la probabilidad, lo que conduce a una mala representación.

2.6. Estimación del tiempo de cálculo

Debido a que se obtuvo una buena representación del estado ligado en la base, se procedió a estimar tiempos de cálculo con dicho estado, pero simulando el tiempo que necesita si se calculara a partir de 2, 3 y 4 nucleones de valencia. Para tales sistemas la base de muchos cuerpos estará formada por todas las contracciones posibles de los estados de partícula simple compatible con el estado de muchos cuerpos que se quiere representar. Por ejemplo, para un sistema de dos partículas con momento angular igual a cero, deben tomarse solo las contracciones con igual número cuántico n, l, j . Cuando el continuo es incluido en la base, también pueden contraerse un ligado n, l, j con todos los estados de dispersión con el mismo l, j .

A modo de simplificar el cálculo, vamos a simular las contracciones tomando tantos loops como partículas contendría el sistema a representar. Para esto se utilizaron 1, 2 y 3 contadores que repiten la construcción de la función de onda mediante los estados de dispersión, es decir: $|\psi\rangle = \sum_{k=1}^N w_{\epsilon_k} c_{\epsilon_k} |u_{\epsilon_k}\rangle$ que reconstruye la función de onda utilizando los estados de dispersión multiplicados por los pesos de Gauss-Legendre y el coeficiente de la función original proyectada sobre dichos estados.

Este cálculo es lo más costoso computacionalmente, considerando que las funciones poseen dos mil elementos, la multiplicación matricial es grande. Es por esto que se elige repetir el mismo dependiendo de N (cantidad de funciones totales de dispersión), N veces para dos neutrones de valencia, N^2 para tres y N^3 para cuatro neutrones de valencia. La elección de repetir el cálculo en potencias de N es puramente estimativo, esta estimación es una cota superior del tiempo necesario debido a que hay reglas de selección que no se tienen en cuenta [8].

En la tabla 2.10 se muestran los tiempos requeridos para simular la representación del estado ligado considerando $N = 96$ debido a que se requieren 32 funciones en cada segmento del contorno.

Neutrones de valencia	Tiempo de cálculo [s]
1	0.351
2	0.473
3	7.944
4	730.568

Tabla 2.10: Tiempo de cálculo estimado para 1, 2, 3 y 4 neutrones de valencia.

Se observó el gran aumento de tiempo que ocurre para calcular un estado de 4 neutrones de valencia. Como el mismo es un tiempo irreducible se optó por considerar distintas formas de realizar la cuadratura para obtener buenos resultados.

Una opción consultada en la bibliografía [15] es la construcción de paquetes de ondas, los mismos consisten en agrupar de forma específica un número determinado de funciones de dispersión y construir una única función, es decir, un paquete. De esta forma se puede reducir el número de funciones que conforman la base de Berggren. El formalismo y desarrollo de dichos paquetes se detalla en el capítulo siguiente.

3.1. Paquetes de ondas reales

Como se mencionó con anterioridad, expandir los estados de un núcleo sobre la base de Berggren tiene sus ventajas, más todavía si se utilizan contornos complejos de integración. Sin embargo, se observó que al utilizar dicho método cuando se desea calcular una representación de muchos cuerpos, el proceso es demasiado lento debido al número demasiado grande de funciones de dispersión necesario para lograr una correcta aproximación.

La implementación de paquetes de ondas mencionada en [7, 12, 14] para su uso en reacciones nucleares, marca un precedente para poder utilizar los mismos en la descripción de la estructura nuclear. La idea fundamental es construir paquetes de ondas conformados por distintas funciones de dispersión cercanas en energía. Con dichas funciones se crea el paquete lo que resulta en una única función la cual es normalizable y permite la reducción de un grupo de funciones en una única que condensa la información de todas.

La construcción de los paquetes de onda $\tilde{u}$ se explica a continuación [7]:

$$\tilde{u}_p(r) = \frac{1}{\sqrt{N_p}} \int_{\varepsilon_{p-1}}^{\varepsilon_p} g(\varepsilon) u(r, \varepsilon) d\varepsilon \quad (3.1)$$

$$\tilde{u}_p(r) \approx \frac{1}{\sqrt{N_p}} \sum_{k=1}^{N_g} h_k g(\varepsilon_k) u(r, \varepsilon_k) \quad (3.2)$$

En la ecuación (3.2) el subíndice p es la etiqueta que nombra al paquete correspondiente en el intervalo de energía $(\varepsilon_{p-1} - \varepsilon_p)$, N_g es la cantidad de funciones que conforman el paquete, N_p es el factor de normalización, h_k son los pesos de Gauss-Legendre y $g(\varepsilon_k)$ es el factor de forma, es decir una función que modula y define la forma del paquete. Cuando el paquete se encuentra en la vecindad de una resonancia $g(\varepsilon) = \sin(\delta_\varepsilon)$ siendo δ_ε el cambio de fase, de otro modo $g(\varepsilon) = 1$ [7].

El factor de normalización N_p se define de la siguiente forma [7]:

$$N_p = \int_{\varepsilon_{p-1}}^{\varepsilon_p} g^2(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.3)$$

Por lo que el mismo está relacionado con el factor de forma $g(\varepsilon)$. Los paquetes de ondas se

construyen con funciones de dispersión que son ortonormales entre sí y como un paquete no es más que la integral de estas funciones ponderadas por el factor de forma, si dos paquetes de onda pertenecen a intervalos disjuntos de energía deben ser ortonormales, y su normalización se muestra a continuación:

$$\langle \tilde{u}_p | \tilde{u}_{p'} \rangle = \frac{1}{\sqrt{N_p N_{p'}}} \int_{\epsilon_{p-1}}^{\epsilon_p} g(\epsilon) d\epsilon \int_{\epsilon_{p'-1}}^{\epsilon_{p'}} g(\epsilon') d\epsilon' \int u(r, \epsilon) u(r, \epsilon') dr \quad (3.4)$$

$$\stackrel{1}{=} \frac{1}{\sqrt{N_p N_{p'}}} \int_{\epsilon_{p-1}}^{\epsilon_p} g(\epsilon) d\epsilon \int_{\epsilon_{p'-1}}^{\epsilon_{p'}} g(\epsilon') d\epsilon' \delta(\epsilon - \epsilon') \quad (3.5)$$

$$\stackrel{2}{=} \frac{1}{N_p} \delta_{p,p'} \int_{\epsilon_{p-1}}^{\epsilon_p} g^2(\epsilon) d\epsilon \quad (3.6)$$

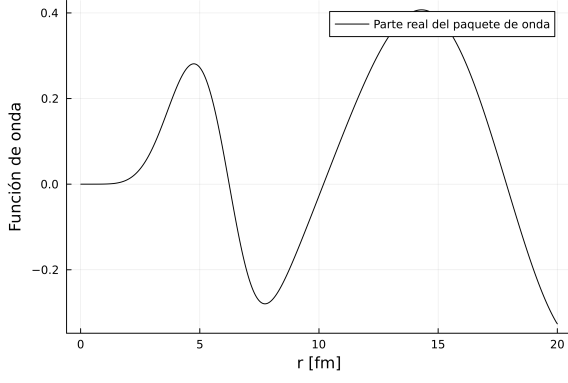
$$\stackrel{3}{=} \delta_{p,p'} \quad (3.7)$$

Para (1) se utilizó que las funciones de dispersión se encuentran normalizadas a la delta de Dirac en energía. En (2) se usó el hecho que ϵ está contenido en el intervalo $[\epsilon_{p-1}, \epsilon_p]$, mientras ϵ' pertenece al intervalo $[\epsilon_{p'-1}, \epsilon_{p'}]$. Siendo estos intervalos disjuntos la delta de Dirac es idénticamente nula. Y en (3) se utilizó la definición de N_p (Eq. (3.3)). Una de las mayores diferencias a la utilización de funciones de dispersión (las cuales son normalizables a la delta de Dirac) es que los paquetes de ondas son idénticos a las funciones de dispersión que lo conforman hasta la primera oscilación, luego poseen un comportamiento asintótico decreciente, lo que permite que los mismos sean normalizables y es posible hallar la constante N_p , para $g = 1$ este factor se reduce a $\epsilon_{p-1} - \epsilon_p$, que es el ancho del paquete en energía.

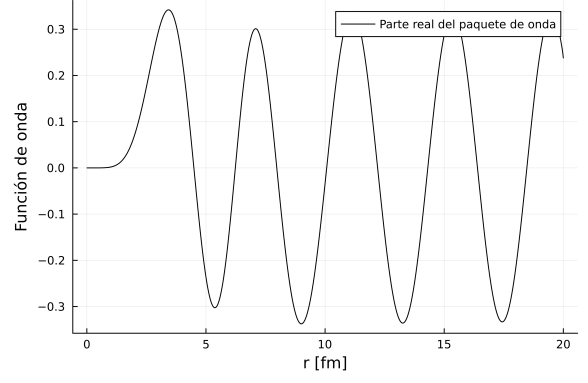
Analizando la bibliografía [7, 12] se encontró que cuando se utilizan paquetes de onda reales es recomendable utilizar como factor de forma el seno de una constante llamada cambio de fase sin (δ_p) que aporta información sobre la resonancia cuando la misma no es contenida porque la integración se produce sobre el eje real. Ante la presencia de una resonancia $\delta(\epsilon)$ cambia rápidamente en la vecindad de la resonancia. Este cambio rápido simula el aumento de densidad de estados de dispersión necesarios que se debió introducir en la representación real para tener una buena descripción de la función de onda. Sin embargo, la implementación de paquetes de onda reales durante este trabajo es un paso intermedio para extender los mismos al plano complejo, por lo que todos los paquetes de ondas utilizan un factor de forma $g(\epsilon) = 1$ para que todas las funciones de dispersión que lo conforman tengan el mismo peso.

En la figura 3.1 se muestran algunas funciones de paquetes de onda reales para distintas energías, en la descripción de cada subfigura se aclara el ancho en energía ΔE que posee el paquete y el rango de energía donde se construyó.

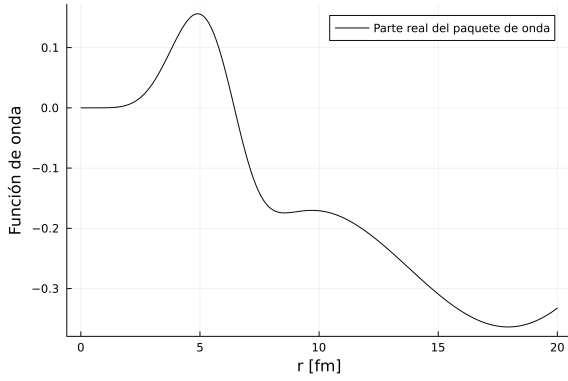
Los paquetes de baja energía (a), (c) y (e) parecen tener un comportamiento patológico, sin embargo, tienen un comportamiento decreciente solo que, al ser de baja energía, poseen una



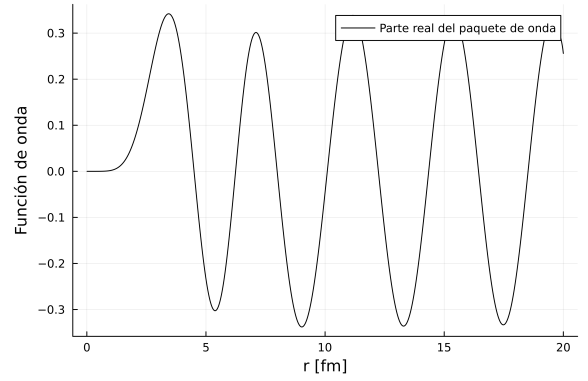
(a) Paquete de baja energía, región (3-4) MeV , $\Delta E = 1 MeV$



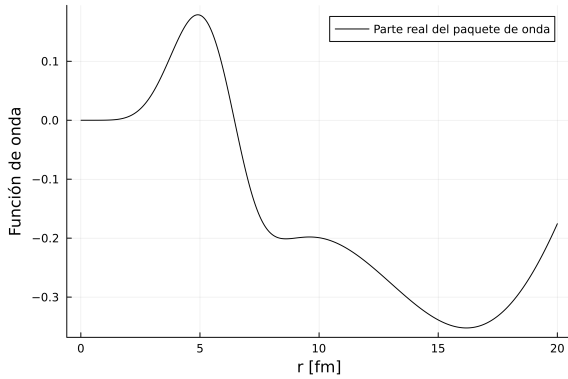
(b) Paquete de baja energía, región (49-50) MeV , $\Delta E = 1 MeV$



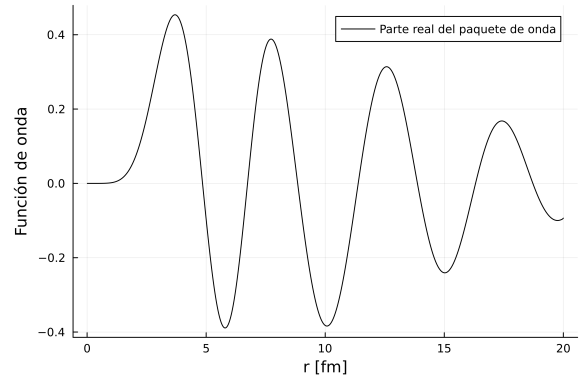
(c) Paquete de alta energía, región (2-4) MeV , $\Delta E = 2 MeV$



(d) Paquete de alta energía, región (48-50) MeV , $\Delta E = 2 MeV$



(e) Paquete de alta energía, región (3.5-4) MeV , $\Delta E = 0,5 MeV$



(f) Paquete de alta energía, región (35-50) MeV , $\Delta E = 15 MeV$

Figura 3.1: Ejemplos de paquetes de onda reales para distintos intervalos de energía.

longitud de onda demasiado grande y no es posible apreciar el decrecimiento en el rango de $(0 - 20) fm$. Al ver la función en un rango mayor se observó con claridad la disminución de la amplitud y las oscilaciones.

El comportamiento decreciente se muestra en la ecuación (3.8) [18], donde se observa que el comportamiento asintótico es decreciente de la forma $\frac{1}{r}$:

$$\tilde{u}_p(r) \propto \sin(k_p r) \frac{\sin((k_p - k_{p-1})r)}{r} \quad (3.8)$$

Es notable en el resto de paquetes la localización de los mismos, sobre todo en los casos de alta energía para los cuales las funciones de dispersión poseen longitudes de onda más cortas.

3.1.1. Definición de base y partición de energía

Los paquetes de onda se utilizaron para crear una base suplantando a los estados de dispersión por estos. Gracias a esto la base utiliza las funciones $\tilde{u}_p(r)$ en lugar de las $u(r, \epsilon_k)$. Para utilizar dichos paquetes es necesario obtener las funciones de dispersión que los conforman, por lo que es necesario determinar cómo se distribuyen esas funciones y dónde se encuentran los bordes de los paquetes en el plano de energía.

La construcción numérica de los paquetes utiliza Gauss-Legendre de dos formas, la primera para delimitar los paquetes, es decir el intervalo $[\epsilon_{p-1}, \epsilon_p]$, para esto se indica la cantidad de paquetes a utilizar y con este número se calculan energías usando G-L, lo que brinda los puntos necesarios. Luego entre el 0,0 MeV y el primer punto se encuentra el paquete número 1 y así sucesivamente, hasta que en el último paquete sus extremos son el último valor de GL y E_{max} .

Ya delimitado cada paquete se indica la cantidad de funciones de dispersión que van a conformar el mismo, este número es constante para todos los paquetes que pertenecen a un mismo segmento del contorno, es decir, para la cantidad de paquetes n_{paq_1} que se encuentran sobre C_1 , todos están conformados por una cantidad funciones de dispersión n_1 . Para el obtener estas funciones de dispersión $u(r, \epsilon_k)$ se procede a utilizar nuevamente G-L dentro del intervalo de energía correspondiente y con los valores obtenidos se calculan las funciones de dispersión.

Finalmente con las funciones $u(r, \epsilon_k)$ correspondientes se construye el paquete de onda $\tilde{u}_p(r)$ y se normaliza en la variable r , exigiendo que la norma de cada uno sea igual a 1. Esta normalización es necesaria porque, como los estados de dispersión se encuentran normalizados a la delta de Dirac, los paquetes no están normalizados, sin embargo, como $\tilde{u}_p(r)$ son funciones localizadas, se pide que la norma, y por ende la probabilidad, sean 1.

En la figura 3.2 se ejemplifica como se delimitan los extremos de los paquetes y como se distribuyen las funciones de dispersión, para esto se simulieron 3 paquetes con 4 funciones en su interior.

La elección de utilizar G-L para delimitar los paquetes y las funciones dentro de los mismos no es trivial. Para determinar qué método ofrece mejores resultados se realizó una prueba con el estado ligado del ^{17}O para $U_0 = 25 \text{ MeV}$ intercambiando los métodos que definen los extremos de

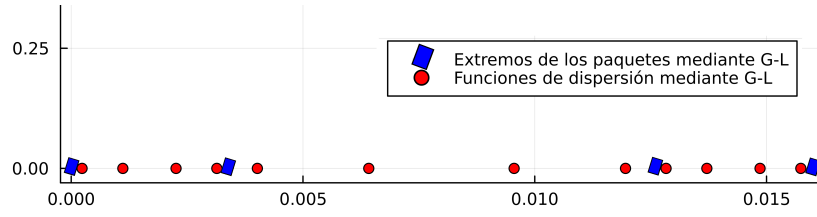


Figura 3.2: Valores de energía para paquetes de onda y sus respectivas funciones de dispersión.

los paquetes y los que definen la distribución de funciones de dispersión que los forman. Como se probó utilizar Gauss-Legendre y funciones equiespaciadas resultaron posibles cuatro combinaciones: GL-GL, equiespaciados-GL, GL-equiespaciados y equiespaciados-equiespaciados. Donde la primera parte hace referencia al método que delimita los extremos de los paquetes y la segunda a como distribuir las funciones de dispersión en su interior.

Para todas las opciones el análisis realizado fue similar al mostrado anteriormente para funciones de onda, utilizando potencias de 2 y comparando χ^2 para cada aproximación. La única diferencia radica en que la aproximación se realizó con 5 paquetes de onda ubicados en el intervalo (0-10) MeV, con un ancho $\Delta E = 2$ MeV conformados por 10 funciones de dispersión cada uno, dichos valores de ΔE y la cantidad de funciones de dispersión se definieron basándose en la bibliografía [7] debido a que se recomienda asegurar la convergencia del mismo con un número elevado de funciones (10) y que el mismo no sea demasiado ancho en energía. Los resultados obtenidos confirman que la mejor opción es utilizar G-L para la delimitación de extremos y para la distribución de funciones en el interior.

En la tabla 3.1 se muestran los valores de χ^2 obtenidos para cada combinación.

	Equiespaciado - Equiespaciado	GL - Equiespaciado	Equiespaciado - GL	GL - GL
χ^2	$1,96 \cdot 10^{-2}$	$1,63 \cdot 10^{-2}$	$2,03 \cdot 10^{-2}$	$1,59 \cdot 10^{-2}$

Tabla 3.1: χ^2 para distintos métodos en la construcción de paquetes de onda.

Una vez confirmada la distribución de funciones para construir los paquetes se construyeron 4 paquetes de onda $\tilde{u}_p(r)$ distribuidos en un rango de 0 – 8 MeV, con 4 funciones $u(r, \varepsilon_k)$ cada uno y un factor de forma $g = 1$. La utilización de 4 funciones es resultado de usar paquetes con un ancho de ≈ 3 MeV la función de onda converge con esa cantidad de estados de dispersión.

Luego se procedió a normalizarlos y analizar la ortonormalidad entre ellos, en la tabla 3.2 se muestran los resultados obtenidos.

Se observó que los paquetes ya normalizados no resultan ser ortonormales de forma estricta, en algunos casos es del orden de 10^{-2} , pero existe un caso (paquete 3 y 4) donde la norma

$\langle \psi_i \psi_j \rangle$	Paquete 1	Paquete 2	Paquete 3	Paquete 4
Paquete 1	1,00	-0,05	0,02	-0,08
Paquete 2	-0,05	1,00	0,15	-0,12
Paquete 3	0,02	0,15	1,00	0,64
Paquete 4	-0,08	-0,12	0,64	1,00

Tabla 3.2: Ortonormalidad de paquetes de onda reales para $\Delta E = 2 \text{ MeV}$.

es 0.635, se intuyó que esto puede ser por ser paquetes cercanos en energía y, por lo tanto, resulten no ser ortonormales. Para comprobar esto se realizó nuevamente el cálculo, pero utilizando 8 paquetes en el mismo intervalo y 4 funciones $u(r, \varepsilon_k)$ en su interior, lo que indica que cada paquete tiene un ancho aproximado de 1 MeV . Las normas obtenidas se muestran en la tabla 3.3.

$\langle \psi_i \psi_j \rangle$	Paq 1	Paq 2	Paq 3	Paq 4	Paq 5	Paq 6	Paq 7	Paq 8
Paq 1	1,00	0,98	0,70	-0,29	-0,03	0,31	0,17	0,04
Paq 2	0,98	1,00	0,81	-0,17	-0,08	0,25	0,17	0,08
Paq 3	0,70	0,81	1,00	0,34	-0,13	0,00	0,08	0,09
Paq 4	-0,29	-0,17	0,34	1,00	0,41	-0,17	-0,20	-0,14
Paq 5	-0,03	-0,08	-0,13	0,41	1,00	0,65	0,24	0,07
Paq 6	0,31	0,25	0,00	-0,17	0,65	1,00	0,83	0,67
Paq 7	0,17	0,17	0,08	-0,20	0,24	0,83	1,00	0,97
Paq 8	0,04	0,08	0,09	-0,14	0,07	0,67	0,97	1,00

Tabla 3.3: Ortonormalidad de paquetes de onda reales para $\Delta E = 1 \text{ MeV}$.

Se ve claramente como la norma aumenta entre paquetes que resultan cercanos en energía, lo que confirma que la ortonormalidad se ve influenciada por la cercanía entre paquetes. Debido a esto es necesario tener cierta precaución al definir la cantidad y los extremos de los mismos.

3.1.2. Convergencia de paquetes de onda reales

Antes de comenzar la representación de funciones de onda es necesario analizar el comportamiento de los paquetes, principalmente como se modifican al cambiar el ancho de energía, la cantidad de funciones y como convergen los mismos. Como no existe una función de onda de “referencia” con la cual comparar dos paquetes de onda se optó por realizar un análisis de convergencia y comparar los distintos paquetes. Se consideró que el número de estados de dispersión que conforman el paquete es suficiente cuando el cambio es muy pequeño. El núcleo que se utilizó para obtener las funciones de dispersión fue nuevamente el ^{17}O con la base generada por h_0 para $U_0 = 25 \text{ MeV}$ para evitar inconvenientes debido a que la resonancia se encuentra lejos del semieje real positivo, $E = (4,03 - i2,04) \text{ MeV}$.

La construcción del paquete se realizó variando el ancho del mismo de la siguiente forma: 0,5 MeV, 1 MeV, 2 MeV, 4 MeV, 8 MeV, 16 MeV, 32 MeV, 50 MeV y 64 MeV. Estos anchos siempre se realizaron en el rango $(0, \Delta E)$ MeV, es decir que todos los paquetes tienen un extremo en el valor 0.0 MeV y el otro es el valor del ancho. Una vez definido el ancho se aumentó el número de funciones de onda que conforman el paquete hasta que la diferencia visual entre dos valores contiguos sea imperceptible como se muestra en la figura 3.3.

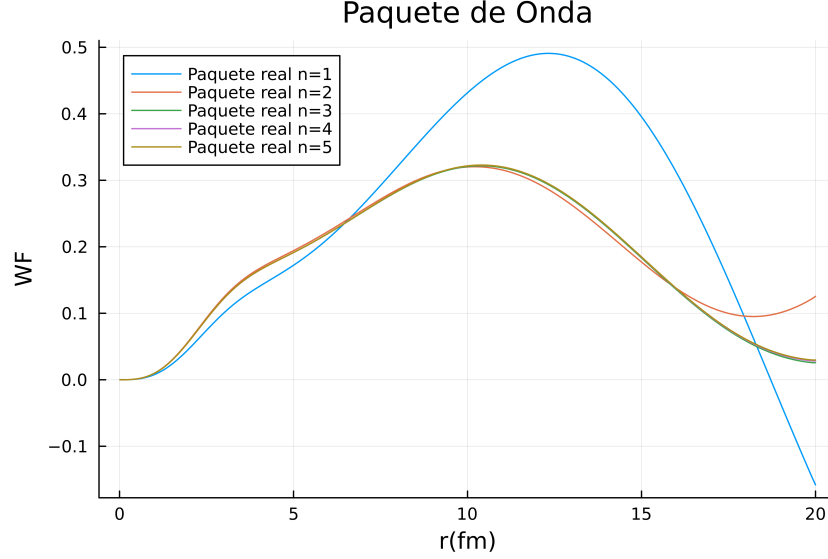


Figura 3.3: Convergencias de un paquete de onda de ancho $\Delta E = 4$ MeV variando el número n de funciones que lo conforman.

Se muestra que la diferencia cuando el paquete está conformado por más de 3 funciones es mínima. Como medida conservadora siempre se eligió un valor mayor al primero que corresponde a funciones muy parecidas, en este caso las funciones son similares a partir de 3 por lo que se determina que el mínimo es 4 funciones de dispersión. En la tabla 3.4 se muestra la cantidad de funciones necesarias para converger cada paquete variando el ancho entre los valores anteriormente mencionados.

Se muestra que la cantidad de funciones para asegurar la convergencia no aumenta de forma lineal, sino que mientras más anchos son, más eficiente es el uso de funciones de dispersión. Ya analizado el comportamiento sin ninguna resonancia cercana se procedió a realizar el mismo análisis para $U_0 = 40$ MeV y observar como varía el número de funciones necesarias, lo que se muestra en la tabla 3.5

Resulta evidente el aumento de funciones necesarias para que el paquete de onda converja, el aumento en todos los casos se explica porque todos los paquetes utilizados comprenden zonas de energía donde la resonancia se encuentra cerca. Para complementar esta explicación

Ancho [MeV]	Cantidad de funciones
1	4
2	4
4	4
8	6
16	10
32	16
50	20
64	20

Tabla 3.4: Convergencia de paquetes de onda para distintos valores de ancho en energía. ($U_0 = 25 \text{ MeV}$)

Ancho [MeV]	Cantidad de funciones
1	25
2	35
4	35
8	55
16	55
32	55
50	65
64	75

Tabla 3.5: Convergencia de paquetes de onda para distintos valores de ancho en energía. ($U_0 = 40 \text{ MeV}$)

se utilizaron paquetes donde los mismos comprendían energías entre 10 MeV y la definida por el ancho, obteniendo resultados idénticos a la tabla 3.4.

Finalmente, a modo de ejemplificar aún más el aumento de funciones mientras más cercana sea la resonancia al eje real, se utilizó $U_0 = 42,5 \text{ MeV}$ donde el número de funciones necesarias aumentó en un orden como se muestra en la tabla 3.6 debido a que la resonancia está muy próxima al eje real ($\frac{\Gamma}{2} = 3,55 \cdot 10^{-3} \text{ MeV}$).

Es notable que la convergencia se mantiene constante en un número elevado de funciones, la interpretación de este patrón se interpretó como un peso preponderante de la resonancia frente a los estados de dispersión lejos de la misma, requiriendo 160 funciones como mínimo para poder lograr la convergencia y evitar las perturbaciones producidas por la resonancia. Finalmente, para analizar mejor aún el comportamiento cerca de la resonancia, se fijó nuevamente el potencial en $U_0 = 40 \text{ MeV}$, donde la misma posee los siguientes valores: $E_0 = 0,798705 \text{ MeV}$ y $\frac{\Gamma}{2} = 0,045956$, se utilizó un paquete que posee un ancho 3 veces el valor de la componente imaginaria es decir un ancho de $0,138 \text{ MeV}$ centrado en el valor real de energía.

Al analizar la convergencia el mismo requirió 7 funciones lo que se considera un buen valor,

Ancho [MeV]	Cantidad de funciones
1	160
2	160
4	160
8	160
16	160
32	160
50	160
64	160

Tabla 3.6: Convergencia de paquetes de onda para distintos valores de ancho en energía. ($U_0 = 42,5 \text{ MeV}$)

ya que permite condensar la información necesaria para la resonancia y luego los paquetes restantes se pueden converger con una cantidad de funciones similares a las mostradas en la tabla 3.4.

Para finalizar el análisis se calculó la representación del estado ligado para distintos anchos de paquete y, por lo tanto, la cantidad de los mismos, en la tabla 3.7 se muestran los valores de χ^2 obtenidos, la definición de la desviación cuadrática media fue la misma que en la ecuación (2.12). Para este caso se utilizó $E_{max} = 1000 \text{ MeV}$, utilizando la cantidad necesaria de paquetes para barrer todo ese rango de energía, es decir 1 paquete de 1000 MeV de ancho o 10 paquetes de 100 MeV de ancho, en la tabla se muestra la cantidad de paquetes junto con su ancho. Es necesario remarcar que para este caso los extremos de los paquetes se delimitaron de forma equiespaciada para tener un mayor control sobre el comportamiento del ancho, luego se reemplazó por los límites dados por Gauss-Legendre

Cantidad de paquetes	Ancho [MeV]	χ^2
20	50	$2,32 \cdot 10^{-2}$
40	25	$1,20 \cdot 10^{-2}$
77	13	$5,69 \cdot 10^{-3}$
143	7	$5,26 \cdot 10^{-3}$
250	4	$2,46 \cdot 10^{-3}$
500	2	$6,98 \cdot 10^{-5}$
1000	1	$4,31 \cdot 10^{-6}$
2000	0.5	$2,85 \cdot 10^{-7}$

Tabla 3.7: χ^2 , ancho y cantidad de paquetes de onda para el estado ligado del ^{17}O

Se muestra que es necesario un gran número de paquetes para obtener una aproximación similar a la obtenida puntualmente, sin embargo, con muy pocos paquetes se obtiene una desviación cuadrática media similar a utilizar contornos complejos, por esto en el siguiente capítulo se estudiará el desarrollo de paquetes de ondas sobre contornos complejos de integración.

3.2. Paquetes de ondas complejos

Para extender los paquetes de energía reales al plano de energía complejo es necesario analizar el comportamiento de los mismos. Para eso inicialmente se realizó el código necesario, utilizando Gauss-Legendre tanto para definir los extremos como para las funciones de dispersión. El tratamiento para los pesos de G-L es idéntico al realizado para el contorno complejo sin paquetes, donde los mismos son escalados mediante las funciones que definen el contorno complejo.

La cantidad de paquetes se dividió por segmentos, definiendo la cantidad y el número de funciones de dispersión que conforman a cada uno, estableciendo que los paquetes de un mismo segmento poseen el mismo número de funciones de dispersión. Se considera que el contorno complejo P^+ tiene cuatro segmentos, C_1 , C_2 , C_3 y C_4 . Para C_1 se definen N_{C_1} paquetes con n_1 funciones de dispersión dentro de cada paquete, para los otros segmentos es análogo definiendo N_{C_2} , N_{C_3} y N_{C_4} ; con sus respectivas cantidades n_2 , n_3 y n_4 .

Como primera aplicación se consideró el estado ligado del ^{17}O con $U_0 = 40 \text{ MeV}$ para el Hamiltoniano auxiliar h_0 . Se analizó la forma funcional de los paquetes y su comportamiento sobre el contorno complejo. El contorno se definió mediante los siguientes vértices: $(0,0 - i0,0) \text{ MeV}$, $(0,016 - i0,0) \text{ MeV}$, $(0,798, -i1,046) \text{ MeV}$, $(1,58 - i0,0) \text{ MeV}$ y $(30 - i0,0) \text{ MeV}$. Sobre cada segmento del contorno se definió un paquete para dar un total de cuatro sobre todo el contorno P^+ .

En la figura 3.4 se muestra el valor absoluto de las funciones de onda de los cuatro paquetes, donde el paquete 1 corresponde al paquete sobre C_1 , el paquete 2 al paquete sobre C_2 y así sucesivamente para los paquetes 3 y 4. La convergencia de los paquetes se realizaron con los siguientes valores: $n_1 = 4$, $n_2 = 6$, $n_3 = 18$ y $n_4 = 10$. La componente imaginaria no se graficó debido a que posee un comportamiento cualitativamente similar a la parte real.

Al observar el comportamiento vemos como la función de onda para C_4 es decreciente lo cual es correcto según el comportamiento esperado de las funciones de onda de los paquetes. Cuando se analizó el comportamiento para el paquete sobre C_1 , la misma se mantiene constante y no decae, pero es 3 órdenes de magnitud menor a las funciones de onda correspondientes a los otros paquetes, por lo que se consideró que aunque no posea el comportamiento decreciente resulta bien comportada de igual forma. Al analizar las funciones de onda para C_2 y C_3 , se mostró que las mismas no decrecen (se observa cerca del límite de 20 fm), lo que era esperable al extrapolar los paquetes al plano complejo, también se remarcó la diferencia de cantidad de funciones necesarias para converger los paquetes entre ambos segmentos, la cual puede ser debida al ancho de la resonancia y como esta afecta a los contornos. Las fallas sobre el comportamiento decreciente asintótico se confirmaron al calcular las funciones de onda para

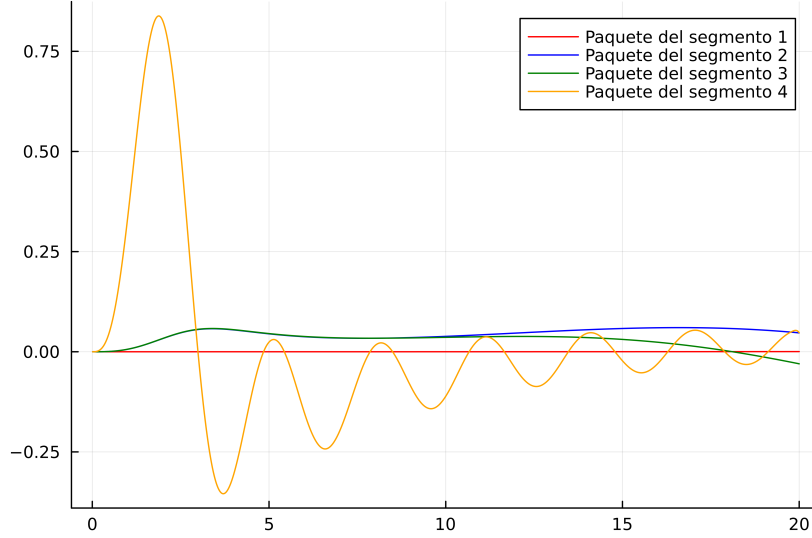


Figura 3.4: Paquetes de onda para cada segmento del contorno complejo.

100 fm , donde los paquetes complejos son mal comportados al aumentar constantemente la amplitud de sus funciones de onda.

3.2.1. Corrección de decaimiento para paquetes complejos

Como los paquetes correspondientes a la parte compleja del contorno P^+ aumentan la amplitud de sus funciones de onda indefinidamente al aumentar r , se pensaron distintas formas de lograr que los mismos tengan un comportamiento convergente. Como primer ensayo se utilizó una distribución de Fermi para modular las funciones de dispersión que conforman el paquete de onda, que posee la siguiente forma funcional:

$$\frac{1}{1 + e^{(r-R)*a}}, \quad (3.9)$$

siendo a un coeficiente capaz de aumentar o disminuir lo pronunciado de la divergencia. Sin embargo, se encontró que el decaimiento es demasiado abrupto indistintamente del valor dado de a , con lo cual la función de onda era prácticamente nula a partir de la distancia arbitraria R . En la figura 3.5 se muestra al paquete 2, que se ubica sobre C_2 como se mencionó en la sección anterior junto con el mismo paquete modulado por la función de fermi para un valor de $a = 5$. En ambos casos se graficó el valor absoluto de la función de onda.

Como alternativa se ensayó utilizar un factor como el utilizado en la regularización de Zeldovich [10] donde se multiplica la función de onda por un factor $e^{-\epsilon r^m}$, donde $m = 1$ para este caso, debido a que esperamos el mismo comportamiento asintótico que en el caso real. Lo que restaría definir es el coeficiente ϵ . Como los paquetes que resultan tener un mal

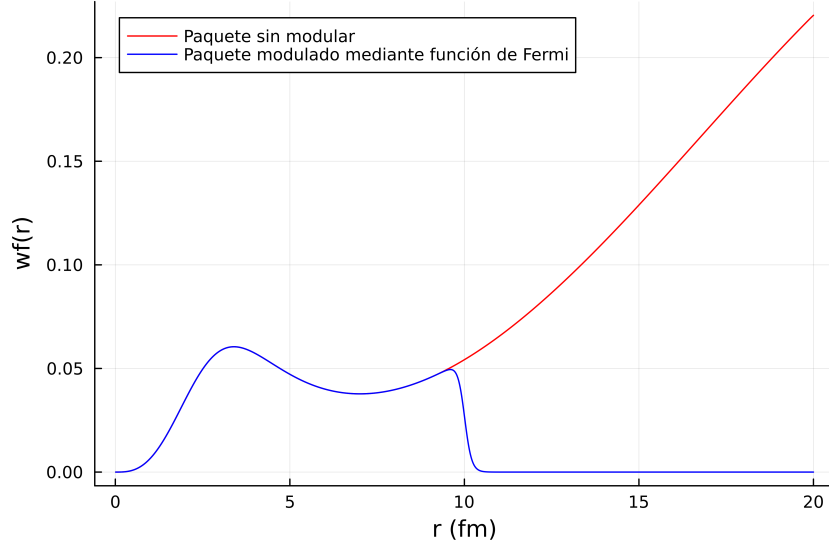


Figura 3.5: Paquetes de onda sobre el segmento C_2 modulado por la función de Fermi y sin modular.

comportamiento son únicamente los complejos, se pensó que esto puede ser debido a la parte imaginaria de la energía compleja del estado de dispersión:

$$\blacksquare u(r) \propto e^{i\alpha r} e^{\gamma r},$$

Donde hemos escrito $k = \alpha - i\gamma$, con e^{ikr} .

Como dichos estados crecen de la forma $e^{\gamma r}$, se utilizó un coeficiente $e^{-1,001\gamma r}$, es decir que, en la regularización $\epsilon = -1,001\gamma$, donde γ es la componente imaginaria del número de onda, relacionada con la energía compleja por la relación usual de dispersión de esa función (k_c). El valor de γ para cada estado de dispersión que conforma el paquete es posible extraerlo del programa ANTI, sin embargo, resulta conveniente escalear el paquete de onda complejo ya construido utilizando un solo factor de amortiguamiento $\bar{\gamma}$. Una opción es utilizar el valor de momento asociado al centro del mismo, sin embargo, al utilizar Gauss-Legendre para distribuir las funciones de dispersión que lo conforman, se consideró que puede no resultar óptimo porque dicho método tiende a acumular las mismas en los extremos. La solución propuesta fue calcular el promedio de los momentos de todas las funciones de dispersión que conforman cada paquete, $\bar{\gamma} = \frac{1}{n_C} \sum_i (-Imk_i)$, donde n_C es el número de estados de dispersión que forman el paquete C y $k = \sqrt{\frac{2\mu\epsilon}{\hbar}}$, con μ la masa reducida del sistema ^{16}O -neutrón, resultando $\epsilon = 1,001 \cdot \bar{\gamma}$ (no confundir el factor de Zeldovich con la energía).

Si los paquetes de onda tienen un comportamiento de la forma $e^{\gamma r}$, con la regularización su comportamiento asintótico sería aproximadamente:

$$\bar{u}_p(r) \propto e^{-0.001\bar{\gamma}r} \quad (3.10)$$

Como se muestra en la ecuación (3.10), tanto la parte real como imaginaria de los paquetes de onda complejos son decrecientes. Al implementar numéricamente esto se observó que la regularización funciona correctamente en todos los casos.

La figura 3.6 muestra como ejemplo nuevamente al paquete correspondiente al contorno C_2 , donde se muestra la parte real e imaginaria del mismo.

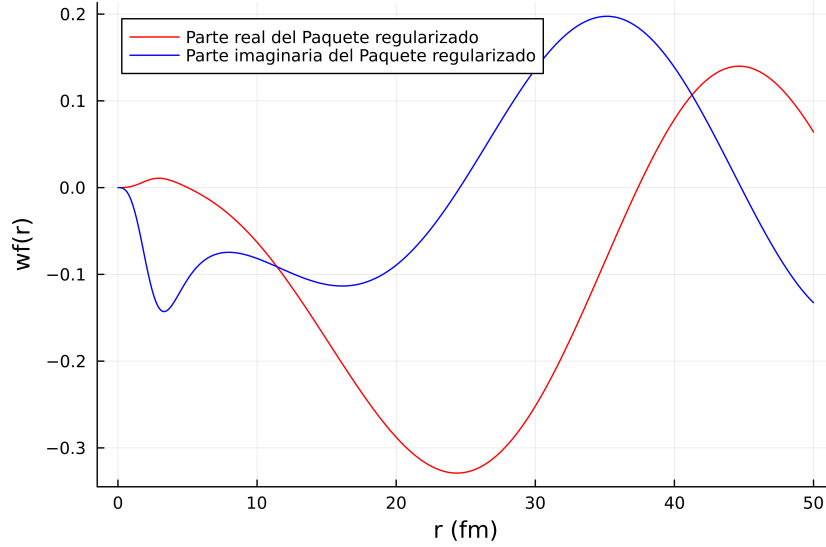


Figura 3.6: Parte real e imaginaria del paquete de onda correspondiente a C_2 regularizado.

Se puede observar en la figura 3.6 que tanto la parte real como imaginaria de la amplitud del paquete de onda regularizado disminuyó debido al factor de amortiguamiento respecto del paquete sin regularizar. Para corregir esta diferencia se reescalo el paquete regularizado de modo que coincida, en la vecindad de la superficie del núcleo, con el paquete original. En particular, para los estados de dispersión complejos para el ^{17}O se normalizó en $R = 10 \text{ fm}$, los paquetes escalados $\hat{u}(r)$ se definen de la forma descrita en la ecuación (3.11)

$$\hat{u}_p(r) = a \bar{u}_p(r), \quad a = \frac{\bar{u}_p(10 \text{ fm})}{\tilde{u}_p(10 \text{ fm})} \quad (3.11)$$

Gracias al escaleo de los paquetes, la amplitud de la función de onda en la región interior del núcleo se ve afectada en menor medida respecto al cambio fuera de la región nuclear donde comienza a decrecer. En la figura 3.7 se graficó el valor absoluto de la función de onda correspondiente a un solo paquete sobre el segmento C_2 sin ninguna regularización ni escala y

también el paquete regularizado y escaleado. Para mostrar mejor el comportamiento a grandes distancias, las funciones de onda fueron calculadas hasta 50 fm .

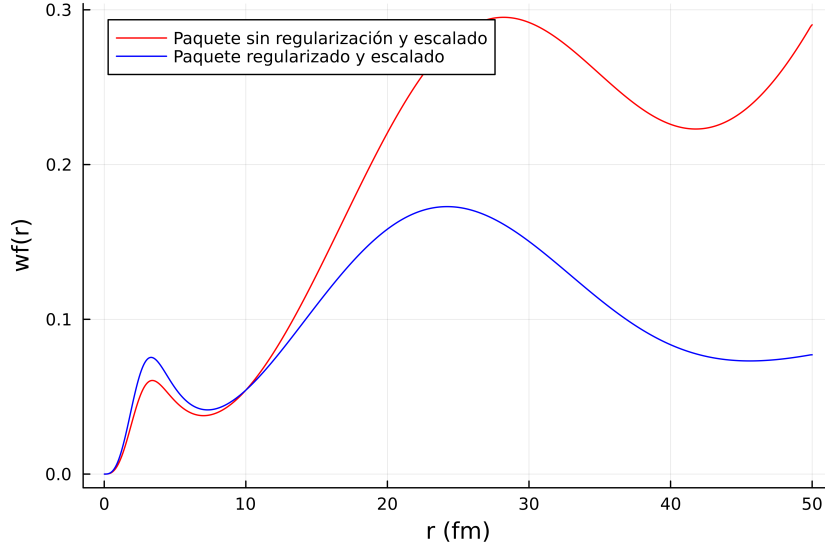


Figura 3.7: Comparación entre dos paquetes, uno sin tratar contra el mismo regularizado y escaleado.

Se destaca la disminución considerable en la amplitud a partir de los 15 fm respecto del paquete sin regularizar.

La nueva representación que reemplaza el continuo no resonante de la representación de Berggren por paquetes de ondas, utiliza regularización y escaleo para los paquetes de onda complejos.

3.2.2. Sobre la norma de los paquetes de onda complejos

Un análisis necesario para los paquetes complejos es observar el comportamiento de la norma. Hemos mostrado que para paquetes de onda reales, la ortonormalización numérica se satisface parcialmente. Es de interés realizar el mismo análisis de ortonormalización para los paquetes formados por estados de dispersión con energía compleja. Para comprobar este comportamiento se utilizó un segmento de 1 MeV comprendido en el eje real entre 5 MeV y 6 MeV que se fue rotando manteniendo el vértice de 5 MeV sobre el eje real y rotando el segmento a ángulos crecientes en el semiplano complejo inferior expresados en radianes. Utilizando nuevamente el caso del ^{17}O con $U_0 = 40 \text{ MeV}$ para el Hamiltoniano auxiliar h_0 . Como el segmento se encuentra alejado de la resonancia, recordando que la misma se encuentra en $(0,798 - i0,046) \text{ MeV}$, se puede apreciar solamente el cambio en la norma causado por utilizar segmentos complejos. En la tabla 3.8 se muestran los resultados para el cálculo de la norma. En la construcción del paquete de onda se utilizaron 8 estados de dispersión. Puede observarse

que la norma es compleja con parte real negativa y parte imaginaria dos órdenes más pequeña. Para ángulos pequeños la norma permanece aproximadamente constante, pero diverge para ángulos cercanos a $\frac{\pi}{2}$. No se hizo un intento de renormalizar estos paquetes como se hizo para el caso de paquetes reales.

Ángulo [rad]	Re(Norma)	Im(Norma)
0,0	0,2470	0,0000
0,1	-0,2471	0,0028
0,2	-0,2448	0,0056
0,3	-0,2402	0,0086
0,4	-0,2331	0,0117
0,5	-0,2237	0,0150
0,6	-0,2120	0,0183
0,7	-0,1980	0,0219
0,8	-0,1817	0,0259
0,9	-0,1628	0,0303
1,0	-0,1404	0,0355
1,1	-0,1115	0,0416
1,2	-0,0635	0,0448
1,3	0,0720	-0,0158
1,4	0,1007	-2,3074
1,5	12 430,8227	3998,5887

Tabla 3.8: Variación de la norma del paquete de onda en función del ángulo. Nótese la divergencia numérica en el ángulo 1.5.

Es notable como la norma se mantiene en el mismo orden para ángulos menores a $1,4 \text{ rad} \approx 80^\circ$, sin embargo, cuando el segmento llega a un valor de $1,5 \text{ rad} \approx 86^\circ$ la norma del paquete diverge, tanto en la parte real como en la imaginaria. Esto indica que para segmentos sumamente verticales la utilización de paquetes de onda no es recomendable.

La tabla 3.9 muestra el solapamiento para dos paquetes de onda sobre el mismo segmento utilizado anteriormente que va de 5 MeV a 6 MeV y luego se rota fijando un extremo en 5 MeV , obteniendo resultados cualitativamente similares a los de la tabla 3.8.

El código construido para implementar los paquetes de onda se muestra en el apéndice de este trabajo, por extensión solo se colocó para el caso complejo.

Ya analizado el comportamiento de los paquetes y sus cambios sobre el plano complejo, se procedió a utilizar los mismos para lograr expandir el estado ligado y la resonancia del ^{208}Pb , esto es, un neutrón en el carozo del ^{207}Pb .

Además, se buscó estimar tiempos de cálculo para sistemas de más neutrones de valencia. Todo esto se desarrolló en la subsección siguiente.

Ángulo [rad]	Re(Solapamiento)	Im(Solapamiento)
0,0	0,1015	0,0000
0,1	-0,1014	0,0013
0,2	-0,1004	0,0027
0,3	-0,0984	0,0041
0,4	-0,0955	0,0055
0,5	-0,0918	0,0070
0,6	-0,0871	0,0085
0,7	-0,0818	0,0102
0,8	-0,0757	0,0119
0,9	-0,0690	0,0140
1,0	-0,0618	0,0165
1,1	-0,0541	0,0202
1,2	-0,0457	0,0264
1,3	-0,0332	0,0407
1,4	0,0354	0,0775
1,5	-14,3731	-7,0153

Tabla 3.9: Variación del solapamiento entre dos paquetes de onda en función del ángulo de rotación.

3.2.3. Expansión utilizando paquetes de onda complejos: ^{208}Pb estado ligado

Partiendo del análisis sobre el comportamiento de los paquetes de ondas complejos, para comparar su efectividad frente a la integración únicamente con funciones de dispersión, se decidió representar los estados ligados y resonancia $h_{11/2}$ del ^{208}Pb como se mostró en la sección 2.5. El Hamiltoniano h que expande el estado ligado posee una energía de $E = -14,88 \text{ MeV}$ y los siguientes parámetros de potencial [4, 11]:

- U_0 : 44.4 MeV
- V_{so} : 16.5 MeV
- a : 0.7 fm
- r_0 : 1.27 fm

En la figura 3.8 se muestra la función de onda del estado ligado hasta una distancia de 20 fm.

Luego el Hamiltoniano auxiliar h_0 que expande la base de Berggren en la cual se quiere representar dicho estado posee los siguientes parámetros de potencial:

- U_0 : 40.4 MeV
- V_{so} : 16.5 MeV
- a : 0.6 fm
- r_0 : 1.27 fm

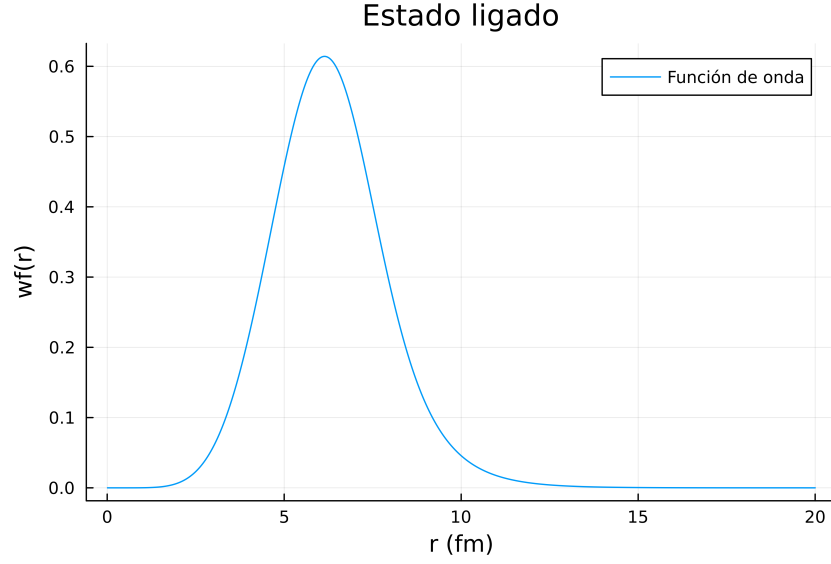


Figura 3.8: Estado ligado del ^{208}Pb para $h_{11/2}$ del Hamiltoniano h .

Este Hamiltoniano tiene un estado ligado y una resonancia en las energías $E = -12,45 \text{ MeV}$ y $E = 4,39 - i0,34 \text{ MeV}$ respectivamente. El contorno sobre el plano complejo está formado por tres segmentos con vértices: $(0,0)$, $(3.12,-1.67)$, $(7.50,0)$ y $(333.17,0) \text{ MeV}$. Este contorno incluye en su interior a la resonancia por lo que la misma forma parte de la base junto al estado ligado y los estados de dispersión complejos, por lo que, la representación del estado ligado de h se realiza todas estas funciones.

Para las funciones de dispersión del contorno, como se encuentra dividido en 3 segmentos, el procedimiento fue colocar únicamente paquetes de onda sobre C_1 ($N_{C_2} = N_{C_3} = 0$) y una vez hallada la convergencia, colocar paquetes sobre C_2 ($N_{C_3} = 0$) y posteriormente sobre C_3 . La cantidad de funciones de dispersión utilizadas en cada paquete fue la necesaria para converger los mismos utilizando el criterio que se usó con los paquetes de ondas reales.

Se representó el estado ligado correspondiente a $h_{11/2}$, en la tabla 3.10 se muestran la cantidad de paquetes utilizada por cada contorno y el número de funciones de dispersión necesarias además de χ^2 . Mientras que en la figura 3.9 se muestra la función de onda aproximada únicamente con el estado ligado de h_0 y luego utilizando también los estados de energía compleja (resonancia y dispersión).

Es necesario destacar que en este caso χ^2 se calculó con el módulo de las funciones de onda y no con su parte real.

Contorno C_1			Contorno C_2			Contorno C_3		
$npaq_1$	n_1	χ^2	$npaq_2$	n_2	χ^2	$npaq_3$	n_3	χ^2
1	8	$4,29 \cdot 10^{-5}$	1	16	$4,60 \cdot 10^{-5}$	1	40	$2,18 \cdot 10^{-5}$
2	8	$4,30 \cdot 10^{-5}$	2	8	$3,21 \cdot 10^{-5}$	2	20	$2,07 \cdot 10^{-5}$
4	4	$4,68 \cdot 10^{-5}$	4	4	$2,21 \cdot 10^{-5}$	4	8	$1,08 \cdot 10^{-5}$
8	4	$4,63 \cdot 10^{-5}$	8	4	$2,63 \cdot 10^{-5}$	8	8	$1,16 \cdot 10^{-5}$
16	4	$5,21 \cdot 10^{-5}$	16	4	$1,63 \cdot 10^{-4}$	16	4	$1,48 \cdot 10^{-5}$
						32	4	$5,09 \cdot 10^{-5}$

Tabla 3.10: Representación del estado ligado de ^{208}Pb utilizando paquetes de onda complejos, resonancia y estado ligado correspondientes a h_0 .

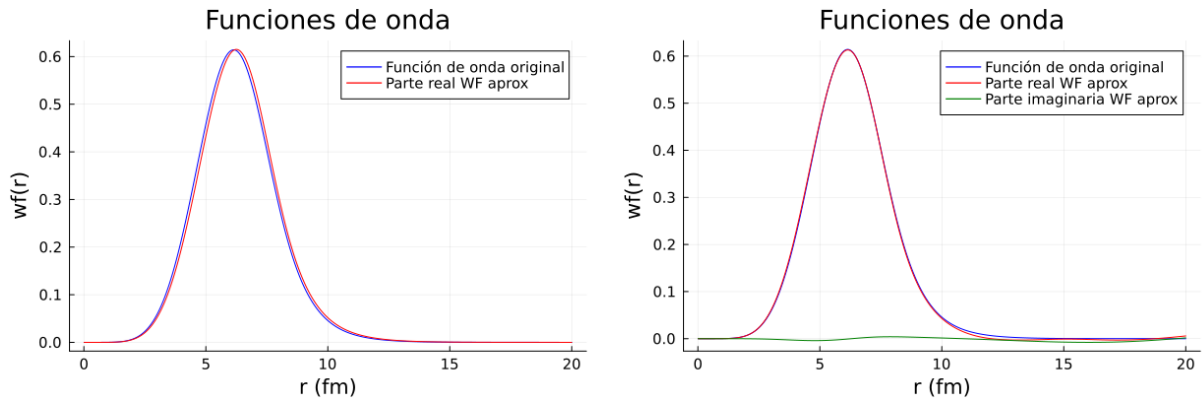


Figura 3.9: Representación del estado ligado de h utilizando solamente el estado ligado de h_0 (izquierda) y utilizando el estado ligado, resonancia y estados de dispersión convergidos (derecha).

Como se observó la parte imaginaria de la función de onda aproximada es prácticamente nula, lo que significa que los estados de dispersión deben compensar la parte imaginaria que aporta el estado de resonancia y a su vez cancelar las contribuciones que aportan los mismos para que, al calcular la representación total, la componente imaginaria sea nula o cercana a cero.

Lo mencionado anteriormente es destacable porque en esta expansión además de utilizar el estado ligado de h_0 , que es puramente real, se utilizaron paquetes de onda complejos, los cuales logran una correcta representación sin influir significativamente en la parte imaginaria.

Cuando se comparó el resultado obtenido en la tabla 3.10 respecto de la utilización únicamente de funciones de dispersión mostrada en la tabla 2.9 vemos que la representación del estado ligado mediante paquetes complejos es aproximadamente 7 veces mejor, lo que en términos de representación la utilización de paquetes brinda una ventaja sustancial.

3.2.4. Expansión utilizando paquetes de onda complejos: ^{208}Pb estado resonante

De forma similar a lo realizado en la sección anterior, se expandió el estado de resonancia $h_{11/2}$ del ^{208}Pb generada por el Hamiltoniano h con energía $E = 2,33 - i0,03 \text{ MeV}$, sobre la base de Berggren expandida por h_0 . En ambos casos los parámetros son los mencionados anteriormente. En la figura 3.10 se muestra la parte real e imaginaria del estado de resonancia de h hasta una distancia de 20 fm .

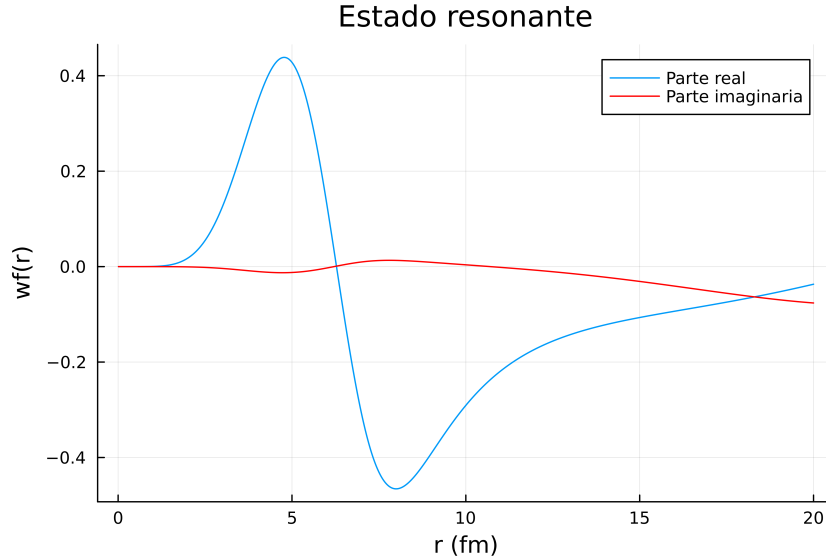


Figura 3.10: Estado resonante del ^{208}Pb para $h_{11/2}$ del Hamiltoniano h .

Al igual que se expandió el estado ligado, la resonancia se representó en la base de Berggren utilizando el estado ligado, resonancia y los estados de dispersión correspondientes a h_0 . Cabe destacar que la representación de los estados de resonancia no es posible sin la utilización de, en este caso, paquetes de onda complejos. De utilizar paquetes reales, los estados con energía compleja no es posible representarlos.

En la tabla 3.11 se detalla los valores utilizados para expandir el estado junto con la cantidad de paquetes, funciones de dispersión que los conforman y χ^2 al igual que pasó con el estado ligado. También en la figura 3.11 se muestra función de onda aproximada una vez que se logró la convergencia utilizando los paquetes de onda complejos.

Contorno C_1			Contorno C_2			Contorno C_3		
$npaq_1$	n_1	χ^2	$npaq_2$	n_2	χ^2	$npaq_3$	n_3	χ^2
1	8	$4,51 \cdot 10^{-3}$	1	16	$3,39 \cdot 10^{-3}$	1	40	$3,36 \cdot 10^{-3}$
2	8	$3,53 \cdot 10^{-3}$	2	8	$5,16 \cdot 10^{-3}$	2	20	$3,27 \cdot 10^{-3}$
4	4	$1,12 \cdot 10^{-2}$	4	4	$2,52 \cdot 10^{-2}$	4	8	$3,10 \cdot 10^{-3}$
8	4	$6,93 \cdot 10^{-2}$	8	4	$1,10 \cdot 10^{-1}$	8	8	$2,88 \cdot 10^{-3}$
16	4	$3,60 \cdot 10^{-1}$	16	4	$4,76 \cdot 10^{-1}$	16	4	$5,53 \cdot 10^{-3}$
						32	4	$7,74 \cdot 10^{-3}$

Tabla 3.11: Representación del estado resonante de ^{208}Pb utilizando el estado ligado, resonancia y paquetes de onda complejos de h_0

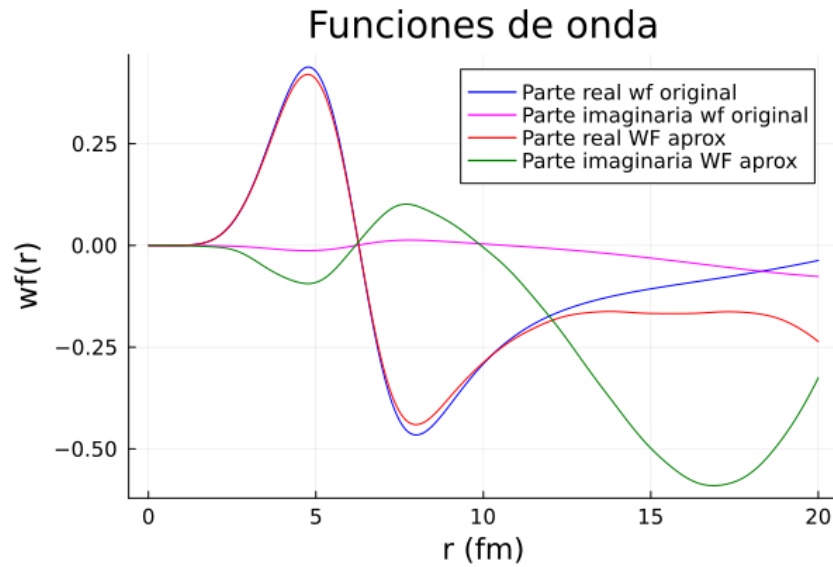


Figura 3.11: Representación del estado resonante de h utilizando el estado ligado, resonancia y estados de dispersión convergidos (derecha).

Se observó que la representación del estado de resonancia obtenida en la tabla 3.11 es un orden de magnitud menor respecto a la aproximación utilizando solamente funciones de dispersión de la tabla 2.9, por lo que el uso de paquetes de ondas complejos brinda mejores resultados aunque aumenta de forma significativa la componente imaginaria de la función de onda.

Un factor importante a considerar es la no convergencia de la función de onda al aumentar la cantidad de paquetes. Esto se observó en el estado ligado y la resonancia, donde si el número de paquetes sobre cada contorno es demasiado grande la representación empeora, por lo que es importante no aumentar dicha cantidad de forma desconsiderada.

3.2.5. Análisis de la regularización

Una prueba que se realizó para lograr una confirmación más sólida sobre el uso de la regularización fue realizar la mejor aproximación del estado ligado pero utilizando los paquetes sin regularizar ni escalar. Al hacerlo se obtuvo un valor de $\chi^2 = 1,23 \cdot 10^{-4}$ para el estado ligado, que es un orden de magnitud mayor al obtenido cuando se utiliza la regularización. Gracias a esto se mostró una mayor solidez en su uso para realizar un tratamiento previo a los paquetes complejos.

3.2.6. Tiempos de cálculo

Ya realizada la representación y obtenido el mejor valor de χ^2 para la misma, se procedió a realizar una comparación en el tiempo de cálculo esperado para 1, 2 y 3 neutrones de valencia como se mostró en la sección 2.6. Esta vez se comparó el tiempo requerido para lograr una aproximación con un χ^2 del mismo orden de magnitud utilizando paquetes de ondas complejos y la integración directa de funciones de dispersión.

Como en la sección 2.5 se utilizaron la cantidad de funciones indicadas en [11] (donde $n_1 = n_2 = n_3$), fue necesario analizar la convergencia de la función de onda sobre cada contorno variando por separado n_1 , n_2 y n_3 . El contorno utilizado es el mismo al de la sección 2.5: (0,0), (3.12,-1.67), (7.50,0) y (333.17,0) MeV, es decir que $E_{max} = 333,17$ MeV.

La mejor aproximación utilizando solamente funciones de dispersión se obtuvo para $n_1 = 8$, $n_2 = 4$ y $n_3 = 32$, obteniendo un valor de $\chi^2 = 7,34 \cdot 10^{-5}$. Esto es casi 7 veces mayor a la mejor aproximación obtenida con paquetes de onda complejos. Como se quiere comparar ambas aproximaciones, se buscó una opción de los mismos que obtengan un valor de χ^2 similar al valor obtenido para las funciones de dispersión, la configuración elegida se detalla a continuación:

- $N_{C_1} = 1, n_1 = 8$
- $N_{C_2} = 1, n_2 = 16$
- $N_{C_3} = 1, n_3 = 40$

Con esta elección de paquetes y funciones de onda se obtiene un valor de $\chi^2 = 4,53 \cdot 10^{-5}$ que es comparable al obtenido mediante la aproximación solamente con funciones de dispersión.

Ahora es posible analizar el tiempo de cálculo, lo que se realizó para 3 neutrones de valencia de igual manera a como se comentó en la sección 2.6 y se obtuvo la tabla 3.12 con los valores de tiempo para la aproximación con funciones de dispersión (AFD), con paquetes de onda complejos realizando una aproximación comparable (PCAC) y con paquetes de onda complejos realizando la mejor aproximación (PCMA).

Método de aproximación	Tiempo [s]
AFD	30,02
PCMA	$8,28 \cdot 10^{-2}$
PCAC	$1,28 \cdot 10^{-3}$

Tabla 3.12: Tiempos de cálculo para 3 neutrones de valencia utilizando los distintos métodos de aproximación.

Durante este trabajo se utilizó el modelo de capas de Gamow para una partícula, representación de Berggren, donde es posible representar distintos estados pertenecientes a partículas del núcleo atómico, permitiendo analizar su estructura. Para lograr dicha representación es necesario realizar proyecciones de la función de onda correspondiente sobre funciones de dispersión, lo que se conoce como el acople con el espectro continuo de energía. El cálculo de dichas proyecciones requiere tiempos de cálculo extensos cuando se tratan problemas con más de un neutrón de valencia en el núcleo, por esto se buscaron métodos de reducir los mismos para el cálculo de resonancia de muchos nucleones.

Al pensar alternativas se comenzó por utilizar contornos de integración complejos en lugar de reales, lo cual reduce el número de funciones necesarias y, por tanto, el tiempo requerido, a la vez que permite expandir estados resonantes con energía compleja. Sin embargo, al medir el tiempo transcurrido en el caso de 4 neutrones se obtuvo un valor de 30.02 segundos que resulta elevado cuando se piensa en escalar el problema a más partículas de valencia. Por esto se planteó la implementación de paquetes de ondas, los cuales “condensan” la información de las funciones de dispersión que los conforman en una sola función, lo que permite reducir la cantidad de proyecciones necesarias para representar el estado del núcleo. Aunque los paquetes de onda reales pueden resultar una buena opción, la cantidad necesaria de los mismos era similar a la cantidad de funciones necesarias cuando se usan contornos complejos por lo que se desarrolló la implementación de paquetes de ondas complejos.

Gracias a estos paquetes se logró reducir la cantidad de los mismos y, por tanto, el tiempo, además de una mejor aproximación. Tanta es la mejora que, si se realiza el cociente entre los tiempos requeridos para las aproximaciones mostradas en la tabla 3.12, al utilizar paquetes de onda complejos que realizan una aproximación similar a la representación usando solamente funciones de dispersión, el tiempo requerido es 23450 veces menor.

Si se compara nuevamente el tiempo de cálculo, pero utilizando ahora la mejor aproximación obtenida con paquetes complejos contra el uso de funciones de dispersión, el tiempo es 360 veces menor, por lo que siempre los paquetes de onda complejos obtienen una reducción significativa de los tiempos requeridos. Finalmente, es necesario remarcar ciertas consideraciones al utilizar paquetes de ondas debido a que, como los mismos no son ortonormales pueden empeorar la aproximación si se utilizan demasiados que sean cercanos en energía. Teniendo en cuenta dicha salvedad es posible concluir que la implementación de paquetes de onda complejos ofrece una

ventaja muy significativa en la reducción de tiempos de cálculo, permitiendo la representación de núcleos con números de partículas de valencia mayores, que era el objetivo de este trabajo, ampliando el desarrollo de cálculo en estructura nuclear.

Bibliografía

- [1] Santiago Affranchino. **Estudio de la estructura nuclear del ^{26}O mediante el formalismo de capas con energía compleja**. Tesina de Licenciatura. Rosario, Argentina: Universidad Nacional de Rosario, 2019 (vid. págs. 4, 12, 15).
- [2] Tore Berggren. **On the use of resonant states in eigenfunction expansions of scattering and reaction amplitudes**. *Nucl. Phys. A* 109:2 (1968), 265-287 (vid. págs. 5, 8).
- [3] Slater J. C. **A simplification of the Hartree-Fock method**. *Phys. Rev.* 81:3 (1951), 385-390 (vid. pág. 3).
- [4] P. Curutchet, T. Vertse y R. J. Liotta. **Resonant random phase approximation**. *Phys. Rev. C* 39:3 (1989), 1020-1031 (vid. págs. 30, 49).
- [5] B. Gyarmati y T. Vertse. **On the normalization of Gamow functions**. *Nucl. Phys. A* 160:3 (1971), 523-528 (vid. pág. 7).
- [6] G. Hagen, M. Hjorth-Jensen y N. Michel. **Gamow shell model and realistic nucleon-nucleon interactions**. *Phys. Rev. C* 73 (2006), 064307 (vid. pág. 23).
- [7] R. Id Betan y M. Filomena. *Notes about the implementation of Berggren basis in FRESKO*. Apuntes no publicados. 2018 (vid. págs. 34, 35, 38).
- [8] R. Id Betan, R. J. Liotta, N. Sandulescu y T. Vertse. **Two-Particle Resonant States in a Many-Body Mean Field**. *Phys. Rev. Lett.* 89:4 (2002), 042501 (vid. pág. 32).
- [9] L. Gr. Ixaru, M. Rizea y T. Vertse. **Piecewise perturbation methods for calculating eigen-solutions of a Schrödinger equation**. *Comput. Phys. Commun.* 85:2 (1995), 217-230 (vid. pág. 11).
- [10] V. I. Kukulin, V. M. Krasnopol'sky y J. Horáček. **Theory of Resonances: Principles and Applications**. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1989 (vid. págs. 5, 44).
- [11] R. J. Liotta, E. Maglione, N. Sandulescu y T. Vertse. **A representation to describe nuclear processes in the continuum**. *Phys. Lett. B* 367 (1996), 1-4 (vid. págs. 13, 29, 30, 49, 54).
- [12] A. Michalik y F. Marsiglio. **A wave packet approach to resonant scattering**. *Am. J. Phys.* 91:2 (2023), 102-109 (vid. págs. 34, 35).
- [13] Nicolas Michel y Marek Płoszajczak. **Gamow Shell Model: The Unified Theory of Nuclear Structure and Reactions**. Vol. 983. Lecture Notes in Physics. Springer, 2021 (vid. págs. 5, 6).
- [14] A. Miller B. S. ans Ekström y C. Forssén. **Wave-packet continuum discretisation for nucleon-nucleon scattering predictions**. *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* (2022) (vid. pág. 34).

- [15] A. M. Moro. **Models for nuclear reactions with weakly bound systems**. *J. Phys.: Conf. Ser.* 966 (2018), 012015 (vid. pág. 33).
- [16] Amos de-Shalit e Igal Talmi. **Nuclear Shell Theory**. New York: Academic Press, 1963 (vid. pág. 1).
- [17] Jouni Suhonen. **From Nucleon to Nucleus: Concepts of Microscopic Nuclear Theory**. Berlin, Heidelberg: Springer, 2007 (vid. págs. 1-4).
- [18] Ian J. Thompson y Filomena M. Nunes. **Nuclear Reactions for Astrophysics**. Cambridge: Cambridge University Press, 2009 (vid. pág. 37).
- [19] T. Vertse, Á. Baran y Cs. Noszály. **JOZSO, a computer code for calculating broad neutron resonances in phenomenological nuclear potentials**. *Comput. Phys. Commun.* 228 (2018), 185-191 (vid. pág. 11).
- [20] T. Vertse, K. F. Pál y Z. Balogh. **GAMOW, a program for calculating the resonant state solution of the radial Schrödinger equation in an arbitrary optical potential**. *Comput. Phys. Commun.* 27:3 (1982), 309-322 (vid. pág. 11).

Código para paquetes de ondas complejos

A

```
1 using Plots
2 using DelimitedFiles
3 using DataFrames
4 using FastGaussQuadrature
5
6
7
8 estado="1"
9 estadonum=1
10 println("Ingresar L (0-s, 1-p, 2-d, 3-f, 4-g, 5-h, 6-i, 7-j): ")
11 angular=readline()
12
13 println("Ingresar 2J: ")
14 general=readline()
15
16 df4 =readdlm("SalidaR/stdout_1.0--1.0.txt")
17 er=df4[1,5]
18 ei=df4[1,6]
19 df11=readdlm("SalidaR/salidaR_1.0--1.0.dat", skipstart=1)
20 x= df11[:,1]
21 FR=ComplexF64.(df11[:,2],df11[:,3])
22
23 function norm(x,a)
24     return exp(x*a)
25 end
26
27
28 println("Ingresar energía máxima; la resonancia es ($er, $ei) [MeV]: ")
29 e_f=parse(Float64,readline())
30
31 println("Cantidad de paquetes para C1, C2, C3 y C4: ")
32 entrada=readline()
33 divi=split(entrada)
34 npaq1=parse{Int64}(divi[1])
35 npaq2=parse{Int64}(divi[2])
36 npaq3=parse{Int64}(divi[3])
37 npaq4=parse{Int64}(divi[4])
```

```

38 npaq=npaq1+npaq2+npaq3+npaq4
39
40 println("Cantidad de funciones que conforman el paquete de C1, C2, C3 y C4: ")
41     entrada=readline()
42     divi=split(entrada)
43     n1=parse(Int64, divi[1])
44     n2=parse(Int64, divi[2])
45     n3=parse(Int64, divi[3])
46     n4=parse(Int64, divi[4])
47
48
49 #Calculo de la funcion de onda original
50 filename = "Salida/salidaB_-50.0.dat"
51 df8 = readdlm(filename, skipstart=1)
52 x = df8[:,1]
53 wf0 =ComplexF64.(df8[:,2], df8[:,3])
54 rango=size(wf0,1)
55
56 coefR=[0.0+0.0im]
57 aproxR= ComplexF64.(zeros(Int64(rango)))
58 for i in 1:rango
59     integralR = ComplexF64(0.0, 0.0)
60     for j in 1:rango
61         integralR += 0.01 * FR[j] * wf0[j] # dr = 0.01
62     end
63     coefR[i] = integralR
64 end
65 aproxR=coefR[1].*FR
66
67 function f2(x)
68     (2/98)*(ei+0.5)-(x*(ei+0.5))/(0.98*er)
69 end
70
71 function f3(x)
72     -(198/98)*(ei+0.5)+(x*(ei+0.5))/(0.98*er)
73 end
74 sinescala=[]
75 e_f1=0.02*er
76 e_f2=er
77 e_f3=1.98*er
78 e_f4=e_f
79
80 npaq=npaq1+npaq2+npaq3+npaq4
81

```

```

82 xp1,wp1=gausslegendre(npq1)
83 xp2,wp2=gausslegendre(npq2)
84 xp3,wp3=gausslegendre(npq3)
85 xp4,wp4=gausslegendre(npq4)
86
87 x1, w1 = gausslegendre(n1)
88 x2, w2 = gausslegendre(n2)
89 x3, w3 = gausslegendre(n3)
90 x4, w4 = gausslegendre(n4)
91
92
93 t1p = @. 0 + (e_f1)/2 * (xp1 + 1)
94 w_s1p = @. wp1 * (e_f1)/2
95
96 t2p = @. e_f1 + (e_f2-e_f1)/2 * (xp2 + 1)
97 w_s2p = @. wp2 * (e_f2-e_f1)/2
98
99 t3p = @. e_f2 + (e_f3-e_f2)/2 * (xp3 + 1)
100 w_s3p = @. wp3 * (e_f3-e_f2)/2
101
102 t4p = @. e_f3 + (e_f4 - e_f3)/2 * (xp4 + 1)
103 w_s4p = @. wp4 * (e_f4 - e_f3)/2
104
105 run('gfortran -g -o cwf.x cwf.for For/coulcx.for')
106 paquetes=[]
107
108 if npaq1==1
109     ancho1=e_f1
110     t1 = @. (t1p[1]-ancho1/2) + (ancho1)/2 * (x1 + 1)
111     w_1scaled = @. w1 * (ancho1)/2
112     for j in t1
113         e=string(j)
114         file=open("Read/sp.dat", "w")
115         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
116         estado, L y 2J.
117         write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," -0. !itysp, 1, 2j,
118         Re(E),Im(E)
119
120         itysp=-2 antibound states
121         itysp=-1 bound states
122         itysp=0 resonance states
123         itysp=1 scattering states
124
125         -----")
126     close(file)

```

```

124     #Corremos cwf para cada valor de energía
125     run('./cwf.x')
126
127     #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
para hacer las salidas
128     df = DataFrame(readldm("Out/wf.dat"), :auto)
129     matriz = Matrix(df)
130
131     #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
append, borra todo lo viejo
132     writeldm("Salidas/salidaS_$j.dat", matriz)
133     end
134     scattering_wfs = []
135
136     energias_str = string.(t1)
137     for e_str in energias_str
138         df3 = readldm("Salidas/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
139         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
140         push!(scattering_wfs, wfs)
141     end
142     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
143     for o in 1:n1
144         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_1scaled[o]
145     end
146     paq .= paq ./ sqrt(anchol) # Normalización del paquete
147     norme=0.0
148     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
149     for k in 1:rango #Norma en r
150         norme+= paq[k]*0.01*paq[k]
151     end
152     paqnorm .= paq ./ sqrt(norme)
153     push!(paquetes, paqnorm)
154 else
155     for u in 1:npaq1
156         if u==1
157             c1=0.0
158             c2=t1p[u]
159         elseif u==npaql
160             c1=t1p[u-1]
161             c2=e_f1
162         else
163             c1=t1p[u-1]
164             c2=t1p[u]

```

```

165     end
166     ancho1=c2-c1
167     t1 = @. c1 + (c2 - c1)/2 * (x1 + 1)
168     w_1scaled = @. w1 * (c2 - c1)/2
169     for j in t1
170         e=string(j)
171         file=open("Read/sp.dat", "w")
172         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía
173         #a, estado, L y 2J.
174         write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," -0. !itysp, 1,
175         2j, Re(E),Im(E)
176
177         itysp=-2 antibound states
178         itysp=-1 bound states
179         itysp=0  resonance states
180         itysp=1  scattering states
181         -----")
182         close(file)
183
184         #Corremos cwf para cada valor de energía
185         run('./cwf.x')
186
187         #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un
188         #DataFrame para hacer las salidas
189         df = DataFrame(readdlm("Out/wf.dat"), :auto)
190         matriz = Matrix(df)
191
192         #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y
193         #lo guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no
194         #es append, borra todo lo viejo
195         writedlm("Salidas/salidaS_$j.dat", matriz)
196     end
197     scattering_wfs = []
198
199     energias_str = string.(t1)
200     for e_str in energias_str
201         df3 = readdlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat",skipstart=1)
202         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
203         push!(scattering_wfs, wfs)
204     end
205     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
206     for o in 1:n1
207         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_1scaled[o]
208     end
209     paq .= paq ./ sqrt(ancho1) # Normalización del paquete

```

```

204         norme=0.0
205         paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
206         for k in 1:rango #Norma en r
207             norme+= paq[k]*0.01*paq[k]
208         end
209         paqnorm .= paq ./ sqrt(norme)
210         push!(paquetes, paqnorm)
211
212     end
213 end
214
215 if npaq2 == 1
216     ancho2=e_f2-e_f1
217     ancho2real=sqrt((f2((t2p[1]+ancho2/2))-f2((t2p[1]-ancho2/2)))^2+ancho2^2)
218
219     t2 = @. (t2p[1]-ancho2/2) + (ancho2)/2 * (x2 + 1)
220     w_2scaled = @. w2 * (ancho2)/2
221     t2i = f2.(t2)
222     for (idx,j) in enumerate(t2)
223         e=string(j)
224         i=string(-t2i[idx])
225         file=open("Read/sp.dat", "w")
226         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
227         estado, L y 2J.
228         write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," ",i," !itysp, 1, 2j,
229         Re(E),Im(E)
230
231             itysp=-2 antibound states
232             itysp=-1 bound states
233             itysp=0  resonance states
234             itysp=1  scattering states
235
236         -----")
237         close(file)
238
239     #Corremos cwf para cada valor de energía
240     run('./cwf.x')
241
242     #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
243     para hacer las salidas
244     df = DataFrame(readdlm("Out/wf.dat"), :auto)
245     matriz = Matrix(df)
246
247     #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
248     guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
249     append, borra todo lo viejo

```



```

243         writedlm("Salidas/salidaS_$j.dat", matriz)
244     end
245     scattering_wfs = []
246     complexk=[]
247     energias_str = string.(t2)
248     for e_str in energias_str
249         df3 = readldlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
250         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
251         kr,kc = readldlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat")[1, :]
252         push!(complexk, ComplexF64(kr, kc))
253         push!(scattering_wfs, wfs)
254     end
255     prom=sum(complexk)/n2
256     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
257     paqse=ComplexF64.(zeros(rango))
258     paqe=ComplexF64.(zeros(rango))
259     for o in 1:n2
260         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_2scaled[o]
261     end
262     expo= norm.(x,imag(prom)*(1.001)) # Factor de fase
263     paqse .= paq ./ sqrt(ancho2real)
264     paqe .= paqse .* expo
265     escaleo= abs(paqse[1000])/abs(paqe[1000]) #Factor de escala a 10fm
266     paqe .= paqe .* escaleo # Aplicación del factor de escala
267     norme=0.0
268     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
269     for k in 1:rango #Norma en r
270         global norme+= paqe[k]*0.01*paqe[k]
271     end
272     paqnorm .= paqe ./ sqrt(norme)
273     push!(paquetes, paqnorm)
274     #push!(sinescala, paqse)
275 else
276     for u in 1:npaq2
277         if u==1
278             c1=e_f1
279             c2=t2p[u]
280         elseif u==npaq2
281             c1=t2p[u-1]
282             c2=e_f2
283         else
284             c1=t2p[u-1]
285             c2=t2p[u]
286         end

```

```

287     ancho2=c2-c1
288     t2 = @. c1 + (c2 - c1)/2 * (x2 + 1)
289     w_2scaled = @. w2 * (c2 - c1)/2
290     ancho2real=sqrt((f2(c2)-f2(c1))^2+ancho2^2)
291     t2i = f2.(t2)
292     for (idx,j) in enumerate(t2)
293         e=string(j)
294         i=string(-t2i[idx])
295         file=open("Read/sp.dat", "w")
296         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
estado, L y 2J.
297         write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," ",i," !itysp, 1, 2j,
Re(E),Im(E)
298
299             itysp=-2 antibound states
300             itysp=-1 bound states
301             itysp=0  resonance states
302             itysp=1  scattering states
303
304         -----")
305         close(file)
306
307     #Corremos cwf para cada valor de energía
308     run('./cwf.x')
309
310     #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
para hacer las salidas
311     df = DataFrame(readaddlm("Out/wf.dat"), :auto)
312     matriz = Matrix(df)
313
314     #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
append, borra todo lo viejo
315     writedlm("SalidaS/salidaS_$j.dat", matriz)
316
317     end
318     scattering_wfs = []
319     complexk=[]
320     energias_str = string.(t2)
321     for e_str in energias_str
322         df3 = readaddlm("SalidaS/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
323         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
324         kr,kc = readaddlm("SalidaS/salidaS_$e_str.dat")[1, :]
325         push!(complexk, ComplexF64(kr, kc))
326         push!(scattering_wfs, wfs)
327     end
328     prom=sum(complexk)/n2

```

```

326     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
327     paqse=ComplexF64.(zeros(rango))
328     paqe=ComplexF64.(zeros(rango))
329     for o in 1:n2
330         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_2scaled[o]
331     end
332     expo= norm.(x, imag(prom)*(1.001)) # Factor de fase
333     paqse .= paq ./ sqrt(ancho2real)
334     paqe .= paqse .* expo
335     escaleo= abs(paqse[1000])/abs(paqe[1000]) #Factor de escala a 10fm
336     paqe .= paqe .* escaleo # Aplicación del factor de escala
337     norme=0.0
338     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
339     for k in 1:rango #Norma en r
340         norme+= paqe[k]*0.01*paqe[k]
341     end
342     paqnorm .= paqe ./ sqrt(norme)
343     push!(paquetes, paqnorm)
344     end
345 end
346
347 if npaq3 == 1
348     ancho3=e_f3-e_f2
349     ancho3real=sqrt((f3((t3p[1]+ancho3/2))-f3((t3p[1]-ancho3/2)))^2+ancho3^2)
350     t3 = @. (t3p[1]-ancho3/2) + (ancho3)/2 * (x3 + 1)
351     w_3scaled = @. w3 * (ancho3)/2
352     t3i = f3.(t3)
353     for (idx,j) in enumerate(t3)
354         e=string(j)
355         i=string(-t3i[idx])
356         file=open("Read/sp.dat", "w")
357         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
358         estado, L y 2J.
359         write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," ",i," !itysp, 1, 2j,
360         Re(E),Im(E)
361
362             itysp=-2 antibound states
363             itysp=-1 bound states
364             itysp=0 resonance states
365             itysp=1 scattering states
366
367         -----")
368         close(file)
369
370         #Corremos cwf para cada valor de energía
371         run('./cwf.x')

```

```

368
369         #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
para hacer las salidas
370         df = DataFrame(readdlm("Out/wf.dat"), :auto)
371         matriz = Matrix(df)
372
373         #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
append, borra todo lo viejo
374         writedlm("Salidas/salidaS_$j.dat", matriz)
375     end
376     scattering_wfs = []
377     complexk=[]
378     energias_str = string.(t3)
379     for e_str in energias_str
380         df3 = readdlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
381         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
382         kr,kc = readdlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat")[1, :]
383         push!(complexk, ComplexF64(kr, kc))
384         push!(scattering_wfs, wfs)
385     end
386     prom=sum(complexk)/n3
387     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
388     paqse=ComplexF64.(zeros(rango))
389     paqe=ComplexF64.(zeros(rango))
390     for o in 1:n3
391         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_3scaled[o]
392     end
393     expo= norm.(x,imag(prom)*(1.001)) # Factor de fase
394     paqse .= paq ./ sqrt(ancho3real)
395     paqe .= paqse .* expo
396     escaleo= abs(paqse[1000])/abs(paqe[1000]) #Factor de escala a 10fm
397     paqe .= paqe .* escaleo # Aplicación del factor de escala
398     norme=0.0
399     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
400     for k in 1:rango #Norma en r
401         norme+= paqe[k]*0.01*paqe[k]
402     end
403     paqnorm .= paqe ./ sqrt(norme)
404     push!(paquetes, paqnorm)
405 else
406     #Calculo del ancho de cada paquete de ondas
407     for u in 1:npaq3
408         if u==1

```

```

409         c1=e_f2
410         c2=t3p[u]
411     elseif u==npaq3
412         c1=t3p[u-1]
413         c2=e_f3
414     else
415         c1=t3p[u-1]
416         c2=t3p[u]
417     end
418     ancho3=c2-c1
419     t3 = @. c1 + (c2 - c1)/2 * (w3 + 1)
420     w_3scaled = @. w3 * (c2 - c1)/2
421     ancho3real=sqrt((f3(c2)-f3(c1))^2+ancho3^2)
422     t3i = f3.(t3)
423     for (idx,j) in enumerate(t3)
424         e=string(j)
425         i=string(-t3i[idx])
426         file=open("Read/sp.dat", "w")
427         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
estado, L y 2J.
428         write(file,estado, " ",angular, " ",general, " ",e, " ",i, " !itysp, 1, 2j,
Re(E),Im(E)
429
430             itysp=-2 antibound states
431             itysp=-1 bound states
432             itysp=0  resonance states
433             itysp=1  scattering states
434         -----")
435         close(file)
436
437         #Corremos cwf para cada valor de energía
438         run('./cwf.x')
439
440         #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
para hacer las salidas
441         df = DataFrame(readdlm("Out/wf.dat"), :auto)
442         matriz = Matrix(df)
443
444         #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
append, borra todo lo viejo
445         writedlm("SalidaS/salidaS_$j.dat", matriz)
446     end
447     scattering_wfs = []
448     complexk=[]

```

```

448     energias_str = string.(t3)
449     for e_str in energias_str
450         df3 = readdlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
451         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
452         kr,kc = readdlm("Salidas/salidaS_$e_str.dat")[1, :]
453         push!(complexk, ComplexF64(kr, kc))
454         push!(scattering_wfs, wfs)
455     end
456     prom=sum(complexk)/n3
457     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
458     paqse=ComplexF64.(zeros(rango))
459     paqe=ComplexF64.(zeros(rango))
460     for o in 1:n3
461         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_3scaled[o]
462     end
463     expo= norm.(x, imag(prom)*(1.001)) # Factor de fase
464     paqse .= paq ./ sqrt(ancho3real)
465     paqe .= paqse .* expo
466     escaleo= abs(paqse[1000])/abs(paqe[1000]) #Factor de escala a 10fm
467     paqe .= paqe .* escaleo # Aplicación del factor de escala
468     norme=0.0
469     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
470     for k in 1:rango #Norma en r
471         norme+= paqe[k]*0.01*paqe[k]
472     end
473     paqnorm .= paqe ./ sqrt(norme)
474     push!(paquetes, paqnorm)
475 end
476 end
477
478
479
480 if npaq4 == 1
481     ancho4=e_f4-e_f3
482     t4 = @. (t4p[1]-ancho4/2) + (ancho4)/2 * (x4 + 1)
483     w_4scaled = @. w4 * (ancho4)/2
484     for j in t4
485         e=string(j)
486         file=open("Read/sp.dat", "w")
487         #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
488         estado, L y 2J.
489         write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," -0. !itysp, 1, 2j,
490         Re(E),Im(E)
491
492         itysp=-2 antibound states

```

```

490             itysp=-1 bound states
491             itysp=0  resonance states
492             itysp=1  scattering states
493         -----")
494         close(file)
495
496         #Corremos cwf para cada valor de energía
497         run(' ./cwf.x')
498
499         #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
para hacer las salidas
500         df = DataFrame(readldm("Out/wf.dat"), :auto)
501         matriz = Matrix(df)
502
503         #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
append, borra todo lo viejo
504         writeldm("Salidas/salidaS_$j.dat", matriz)
505     end
506     scattering_wfs = []
507
508     energias_str = string(t4)
509     for e_str in energias_str
510         df3 = readldm("SalidaS/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
511         wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])
512         push!(scattering_wfs, wfs)
513     end
514     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
515     for o in 1:n4
516         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_4scaled[o]
517     end
518     paq .= paq ./ sqrt(ancho4) # Normalización del paquete
519     norme=0.0
520     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
521     for k in 1:rango #Norma en r
522         norme+= paq[k]*0.01*paq[k]
523     end
524     paqnorm .= paq ./ sqrt(norme)
525     push!(paquetes, paqnorm)
526 else
527     #Calculo del ancho de cada paquete de ondas
528     for u in 1:npaq4
529         if u==1
530             c1=e_f3

```

```

531     c2=t4p[u]
532 elseif u==npaq1
533     c1=t4p[u-1]
534     c2=e_f4
535 else
536     c1=t4p[u-1]
537     c2=t4p[u]
538 end
539 ancho4=c2-c1
540 t4 = @. c1 + (c2 - c1)/2 * (x4 + 1)
541 w_4scaled = @. w4 * (c2 - c1)/2
542 for j in t4
543     e=string(j)
544     file=open("Read/sp.dat", "w")
545     #Acá reescribimos el archivo sp.dat con los nuevos valores de energía,
546     estado, L y 2J.
547     write(file,estado," ",angular," ",general," ",e," -0. !itysp, 1, 2j,
548     Re(E),Im(E)
549             itysp=-2 antibound states
550             itysp=-1 bound states
551             itysp=0  resonance states
552             itysp=1  scattering states
553     -----")
554     close(file)
555
556     #Corremos cwf para cada valor de energía
557     run('./cwf.x')
558
559     #Leemos el archivo wf.dat de la carpeta Out y lo guardamos en un DataFrame
560     para hacer las salidas
561     df = DataFrame(readdlm("Out/wf.dat"), :auto)
562     matriz = Matrix(df)
563
564     #Generamos el nombre del archivo de salida con el valor de energía y lo
565     guardamos en otra carpeta, va a reescribir todo archivo con el mismo nombre, no es
566     append, borra todo lo viejo
567     writedlm("SalidaS/salidaS_$j.dat", matriz)
568 end
569 scattering_wfs = []
570
571 energias_str = string.(t4)
572 for e_str in energias_str
573     df3 = readdlm("SalidaS/salidaS_$e_str.dat", skipstart=1)
574     wfs = ComplexF64.(df3[:,2],df3[:,3])

```



```

570         push!(scattering_wfs, wfs)
571     end
572     paq=ComplexF64.(zeros(rango))
573     for o in 1:n4
574         paq .= paq .+ scattering_wfs[o] .* w_4scaled[o]
575     end
576     paq .= paq ./ sqrt(ancho4) # Normalización del paquete
577     norme=0.0
578     paqnorm=ComplexF64.(zeros(rango))
579     for k in 1:rango #Norma en r
580         norme+= paq[k]*0.01*paq[k]
581     end
582     paqnorm .= paq ./ sqrt(norme)
583     push!(paquetes, paqnorm)
584 end
585 end
586
587
588 w_pscaled=vcat(w_s1p, w_s2p, w_s3p, w_s4p)
589 coeficientesr = ComplexF64.(zeros(Int64(npaq)))
590 aproxS = ComplexF64.(zeros(Int64(rango)))
591
592 for idx in 1:npaq
593     paquete = paquetes[idx]
594     integral = ComplexF64(0.0, 0.0)
595     for j in 1:rango
596         integral += 0.01 * paquete[j] * wf0[j] # dr = 0.01
597     end
598     coeficientesr[idx] = integral
599 end
600 aproxS .= vec(hcat(paquetes...)) * (coeficientesr)
601
602
603 #Graficamos
604 chifinal=[]
605 wfA=aproxR+aproxS
606 for p in 1:1
607     chi = 0.0
608     for i in 1:rango
609         chi += (real(wfA[i]) - real(wf0[i]))^2
610     end
611     chinorm=chi/(2000)
612     push!(chifinal, chinorm)
613 end

```

```

614 println("Valor de chi cuadrado normalizado: ", chifinal[1])
615
616 gr()
617 graf=plot(title="Funciones de onda", xlabel="r (fm)", ylabel="wf(r)", legend=:topright)
618 plot!(x,real(wf0), label="Función de onda original", color=:blue)
619 plot!(x,real(wfA), label="Parte real WF aprox", color=:red)
620 plot!(x,imag(wfA), label="Parte imaginaria WF aprox", color=:green)
621 display(graf)

```

Listing A.1: Código de cálculo de funciones de onda