

Trabajo Fin de Carrera

Efectos de las correlaciones de pairing (BCS) en modelos nucleares relativistas

Licenciatura en Ciencias Físicas

Autor: Javier Cavia Pérez Tutor: Ramón Niembro Bárcena Diciembre 2012



Departamento de Física Moderna Facultad de Ciencias Avda. Los Castros s/n 39005 Santander (Spain) Email: ramon.niembro@unican.es

D. Ramón Niembro Bárcena, Profesor de Física Nuclear del Departamento de Física Moderna informa:

Que el trabajo que se presenta en esta Memoria titulado "Efectos de las correlaciones de pairing (BCS) en modelos nucleares relativistas", ha sido realizado por Javier Cavia Pérez bajo mi dirección en la Universidad de Cantabria y emite su conformidad para que dicha Memoria sea presentada como Trabajo Fin de Carrera de la Licenciatura en Física.

Santander 10 de Diciembre de 2012.

Fdo: Ramón Niembro Bárcena

Agradecimientos

Quisiera mostrar mi agradecimiento a todas las personas que han hecho posible la realización de este trabajo, comenzando por,

El profesor Ramón Niembro Bárcena, por la dedicación, motivación y la confianza que ha depositado en mí y por hacerme ver que hay que seguir avanzando siempre.

Y a mis padres y hermanos, por todo el apoyo recibido todo este tiempo, porque siempre han creído en mí en todos los ámbitos, y porque siempre estarán ahí ayudándome en lo que sea que haga.

Índice

1.	Objetivos e interés del tema 1					
2.	Introdu	ıcción	2			
3.	Marco teórico					
	3.1.	4				
	3.1	.1. Introducción	4			
	3.1.2. Superconductividad y superfluidez					
	3.1.3. Evidencias experimentales del pairing					
	3.1	.4. Ecuaciones BCS	9			
	3.2.	Modelos nucleares relativistas. Modelo NL3	12			
	3.2	.1. Introducción	12			
	3.2	.2. Formulación relativista	12			
	3.2	.3. Relación con la QCD (modelo quark)	13			
	3.2	.4. Formalismo y ecuaciones básicas del modelo NL3	14			
4.	Program	ma de cálculo de estructura nuclear				
	4.1.	Introducción	18			
	4.2.	Ecuaciones BCS para protones y neutrones	18			
	4.3.	Definición de G_n y G_p . Elección de la ventana de estados	19			
	4.4.	Método de resolución de las ecuaciones BCS	20			
	4.5.	Convergencia y autoconsistencia del programa de cálculo de estruc-	tura			
		nuclear	22			
	4.6.	Resultados del programa basado en el modelo NL3	24			
5.	Resulta	ados				
	5.1.	Introducción	27			
	5.2.	Núcleos estudiados	27			
	5.3.	Potencial efectivo	28			
	5.4.	Diferencia del potencial total y de la densidad de los estados con				
		respecto a la interacción de pairing	30			
	5.5.	Estudio extendido a dos cadenas de isótopos	43			
6.	Conclu	siones	46			
7.	Bibliog	grafía	48			

1. Objetivos e interés del tema

Este trabajo tiene como objetivo específico analizar los efectos de las correlaciones de pairing (CP) en el núcleo. Estas correlaciones forman la base de la teoría BCS, capaz de explicar la aparición de la superconductividad en diversos sistemas. El interés de este trabajo radica en que la teoría BCS aplicada al caso nuclear presenta todavía muchas incertidumbres. Por otra parte, varias líneas de investigación actuales y con una gran proyección para el futuro en el campo de la Física Nuclear, requieren una mejor comprensión y fiabilidad de esta teoría. Asimismo, los resultados obtenidos en este campo serían aprovechables en otros escenarios, puesto que las CP asociadas a la superfluidez y la superconductividad son aplicables a un inmenso conjunto de sistemas.

Para alcanzar este objetivo en nuestro caso, debemos cubrir otro previo consistente en la resolución de las ecuaciones BCS para protones y neutrones, y su implementación en un modelo nuclear. Tras llevar a cabo esta etapa, estaremos en condiciones de ver los cambios inducidos en los observables nucleares como resultado de la presencia de estas correlaciones.

2. Introducción

Superconductividad y superfluidez son dos fenómenos que, bajo ciertas condiciones, se pueden presentar en sistemas fermiónicos. Este hecho comporta que haya una gran diversidad de sistemas susceptibles de experimentarlos. Desde los macroscópicos, como los sólidos, hasta los microscópicos, como es el caso del núcleo. Todo este conjunto incluye, entre otros, objetos tales como: clusters atómicos; fulerenos (grafeno) C60; átomos fermiónicos, que forman moléculas bosónicas [1]. Incluso el mecanismo de Higgs, que se puede considerar como un tipo de superconductividad que ocurre en el vacío por la formación de pares quark-antiquark [2]. En consecuencia, este campo adquiere un enorme interés, no sólo desde el punto de vista teórico sino también desde el experimental, referido a sus aplicaciones prácticas.

La teoría BCS [3], basada en las correlaciones de pairing (CP), funciona bien en el caso de sistemas macroscópicos, no así en el caso nuclear: "Even today there is no consistent theory of pairing in nuclei available" (Schmidt 2010) [4]. En la actualidad existen una serie de temas en Física Nuclear que, con el avance de las técnicas experimentales, proporcionan nuevos datos que exigen una interpretación teórica y nuevas predicciones basadas en modelos. Este es el caso de la búsqueda de nuevos elementos, mediante la exploración de regiones alejadas del valle de estabilidad; se piensa que en dichas zonas la existencia de nuevos núcleos se conseguiría, sobre todo, por medio de las CP. Otro tema sobre el que se trabaja es la formación de núcleos con halo, donde también las CP jugarían un papel muy importante [5]. Asimismo, las CP también deben de ser muy influyentes en reacciones nucleares de fisión y de fusión. Alrededor de estos temas se suscitan, entre otras, una serie de cuestiones tales como: ¿Pueden existir fases superfluidas o superconductoras en alguna región del núcleo? ¿Dónde se localizan con preferencia las CP, en el interior o en la superficie del núcleo? ¿Se puede obtener una función de la intensidad de las CP en términos de observables nucleares? ¿Es posible que en la piel de neutrones pueda haber una transición BCS→BEC [6] (condensación de Bose-Einstein)? ¿Existen fases superconductoras en las estrellas de neutrones? Todas estas preguntas demandan una teoría de las CP más evolucionada y fiable que la actual, que presenta bastantes incertidumbres.

En estos últimos años los modelos nucleares relativistas [7] han constituido una valiosa herramienta en el estudio del núcleo. En este trabajo haremos uso de uno de ellos, el NL3 [8], al que incorporaremos las CP viendo el impacto que causa sobre él; tanto en su estructura como en sus predicciones. Una peculiaridad de nuestro desarrollo radica en el hecho de que haremos el equivalente a una teoría de perturbaciones, pero basada en un análisis gráfico, espacial. Por este procedimiento, se obtiene una comprensión mucho más intuitiva y cercana que la que se derivaría de la aplicación formal de la teoría de perturbaciones, que por otra parte resultaría inabordable debido a su complejidad el aplicarla a nuestro problema.

La estructura del trabajo es la siguiente: En la 1^a sección, Marco teórico, se describe la superconductividad y superfluidez y su relación con el núcleo. Asimismo, se tratan los fundamentos de los modelos relativistas nucleares, y en particular del modelo del que haremos uso. La 2^a sección expone nuestro trabajo realizado, consistente en la resolución de las ecuaciones BCS y su inclusión en los cálculos de estructura nuclear del modelo descrito antes. Las aplicaciones a casos particulares se muestran en la siguiente sección, en la que nuestra labor ha consistido en aplicar este formalismo a los núcleos: ¹²⁸Te y⁸⁸Kr, sobre los que se realiza un análisis de los efectos producidos por las CP; después, extendemos este estudio a las cadenas isotópicas de las que dichos núcleos forman parte. Por último, se exponen las conclusiones que se derivan de este análisis así como alguna posible vía de continuación.

3. Marco Teórico

3.1 La interacción de pairing

3.1.1 Introducción

En los años 50 del siglo pasado, Bardeen, Cooper y Scherieffer [3] desarrollaron una teoría, conocida desde entonces como teoría BCS debido a sus iniciales, la cual consistía en una teoría microscópica de la superconductividad, incorporando la idea de los pares de Cooper dando un tratamiento consistente con el principio de exclusión de Pauli. Durante la misma década, A. Bohr, Mottelson y Pines [9] pronto vieron que podía ser la solución a la comprensión para partículas con energías de excitación mucho mayor que las de los orbitales electrónicos, del orden del MeV. Dichos sistemas se corresponden con los núcleos. Además, era favorable aplicarlo en núcleos que tienen un número par de neutrones y protones (núcleos par-par) al comparar la energía de excitación, que en núcleos en los que el número de neutrones o protones es impar.

El éxito fue tal que al poco tiempo se aplicó el modelo a estrellas de neutrones. Su impacto en los modelos de partículas elementales y de simetría rota en física de alta energía ha sido profundo. También se formó la base de predicción de un superfluido ${}^{3}He$ de estados degenerados disueltos en ${}^{4}He$ superfluido. Más tarde fue aplicado a la capacidad de los quarks de generar plasmas de quark-gluón, y más recientemente en átomo ultrafríos [10].

3.2.2 Superconductividad y superfluidez

Dentro de los sistemas fermiónicos se puede producir un fenómeno de formación de pares de partículas correlacionadas que tiene un origen distinto atendiendo al sistema en el que se produzca. Cabe diferenciar sistemas en los que este fenómeno se produce, ya sean superconductores sólidos, superfluídos y el caso nuclear.

Uno de estos sistemas y quizá el más conocido sea el de los superconductores sólidos. Aquí, los electrones cerca de la superficie de Fermi en dicho material interactúan para formar pares correlacionados, los cuales conforman los denominados pares de Cooper [3]. Estos son construidos a partir de estados en los cuales los dos electrones tienen espín total igual a cero, y momento lineal igual y opuesto k y - k.

La mejor manera de verlo es pensando en un cristal. Debido al acoplamiento ocasionado por los iones positivos de este y por las fuerzas electrostáticas, estos "ven" a los electrones moviéndose a través de la distorsión producida en el cristal, la cual influencia a su vez al movimiento del resto de electrones. De igual manera, podemos decir que el electrón emite y absorbe un fonón, el cual es una cuantificación de una onda que se propaga por el cristal. Esa interacción causa dispersión de un par de electrones desde los estados (k, -k) a (k', -k') con una amplitud $V_{k'k}$ que depende del acoplamiento $e^- - fonón$ y del espectro del fonón.



Figura 1: Esquema del intercambio de un fonones entre el par de electrones y representación de la deformación de la red cristalina al desplazarse los iones positivos que la componen.

La interacción que produce la correlación de pairing en un superconductor normal es el resultado de un delicado balance de la repulsión coulombiana proyectada por los efectos de polarización dinámica de ambos electrones.

Pero el fenómeno de formación de pares de Cooper también puede darse en sistemas mucho más pequeños, como pueden ser los núcleos atómicos. Aquí la situación es muy diferente, ya que es la fuerza nuclear fuerte la que actúa, y es para distancias muy pequeñas, ($\leq 0.75 \ fm$) atractiva. La interacción atractiva actúa sobre todo alrededor del nivel de Fermi, pasando de ser esta distribución de abrupta a difusa, y es ahí donde las partículas se difunden y cambia el nivel de ocupación de los estados cercanos al nivel de Fermi.

En consecuencia, el principal origen del pairing en el núcleo es debido a la fuerza nuclear fuerte entre nucleón-nucleón y la formación de pares de Cooper se da debido al solapamiento de las funciones de onda de cada miembro del par. La extensión donde solapan las funciones de onda de las dos partículas que forman el par es lo que define la longitud de coherencia [11].

En un superconductor, la longitud de coherencia viene dada por la ecuación

$$\xi = \hbar v_F / 2\Delta \tag{1}$$

que mide el tamaño del par de Cooper, donde v_F es la velocidad de Fermi y el término 2Δ representa la energía de gap entre los estados excitados formados por la ruptura de pares. La energía de gap estabiliza el estado superconductor. Los efectos térmicos pueden romper pares, y a una temperatura crítica T_c la energía de gap llega a ser cero, los pares se rompen y hay una transición de una fase de superconducción a otra normal. La longitud de coherencia es grande comparada con el espaciamiento interatómico en superconductores sólidos, pero pequeña si se compara con el tamaño

típico de un fragmento de superconductor en sí. En el caso del núcleo, la situación es diferente. Si utilizamos el apropiado número de onda de Fermi ($k_F \sim 1.36 \ fm^{-1}$) tenemos que $\hbar v_F \approx 54 \ MeV fm$ y así $\xi = 27/\Delta \ fm$. Sin embargo, para un núcleo típico con A = 140, $\Delta \sim 1 MeV$ y $\xi \sim 27 fm$, y si se compara con el radio nuclear $R = 1.2A^{1/3} \ fm \cong 6.3 \ fm$ para un núcleo con A = 120, vemos que la longitud de coherencia es bastante mayor que el radio nuclear. Así vienen a darse en el resto de núcleo de la tabla periódica. En un núcleo, el tamaño del par de Cooper viene dado por el tamaño nuclear en vez de por la longitud de coherencia. Cabe comentar que, aunque las CP se debilitan con el aumento de la energía de excitación, en este trabajo no se han considerado núcleos que giran ni que vibran, sino núcleos estáticos en el estado fundamental, a una temperatura igual a 0 K.

Cuando la longitud de coherencia del par es pequeña en comparación a la distancia entre pares, cada uno de estos, formado por dos fermiones, actúa como si fuera un bosón, y puede ser tratado su comportamiento a partir de la estadística de Bose. El estado que forman se denomina condensado de Bose-Einstein (BEC) [12], el cual, por los aspectos antes mencionados, ha de darse a temperaturas ultrabajas, donde tales temperaturas sean menores que la temperatura crítica y así no se rompan los pares de Cooper. Esto se ve bien reflejado en la figura 2, donde los pares a la izquierda están muy próximos y su longitud de coherencia es mucho menor que en el caso del sistema dominado bajo el BCS, por lo que el BEC será un estado de superfluidez.



Figura 2: Esquema que muestra la evolución de un sistema BCS a BEC y viceversa. En la parte superior se da una breve explicación de los como ocurren ambos, para a continuación mostrar que forma tienen los pares correlacionados y el tamaño de estos, donde ξ indica la longitud de coherencia y *d* la distancia entre los pares. Cuanto menor sea el cociente de ambos más próximo estará el sistema a evolucionar hacia el BEC. Por último se muestra sobre que valores se encuentra el cociente del Gap de pairing y la energía de Fermi. Ello indica que si el cociente es relativamente alto se dará una tendencia a alcanzar el BEC.

3.2.3 Evidencias experimentales del pairing

El potencial del modelo de capas es el potencial promedio para un nucleón que se mueve en el núcleo. Tiene componentes central y de espín-órbita, y en un núcleo esférico los estados del nucleón están descritos por los números cuánticos n, l y j degenerados en m. Los nucleones interactúan de forma fuerte, en un corto alcance, lo que contribuye a una interacción residual entre nucleones. Dos nucleones pueden aprovecharse de la interacción residual para minimizar su energía de ligadura, moviéndose con estados con el mismo valor de j, pero con m igual y opuesta. La interacción residual para escrito, o denominado *en inversión temporal* [13], y el momento angular total del par es cero.



Figura 3: Representación esquemática de dos orbitas en inversión temporal. Dos nucleones idénticos se supone que se mueven en órbitas en inversión temporal etiquetadas por los números cuánticos *l* y *m*.

A continuación veremos como el estado fundamental de un núcleo con un número par de neutrones y de protones es obtenido mediante el acoplamiento de cada par de nucleones en estados con energías cercanas a la energía de Fermi, para formar pares de momento angular cero. Los estados excitados se forman rompiendo los pares, y los estados más bajos son constituidos destruyendo un par. Esos estados tienen una energía de excitación aproximadamente de 2Δ , la cual constituye la energía de ligadura.

El nucleón impar en un núcleo con un número impar de neutrones o de protones debe permanecer desapareado. Se puede obtener una descripción cualitativa de los estados excitados más bajos de un núcleo en términos de las órbitas disponibles del nucleón desapareado. En esta aproximación los grados de libertad de los nucleones apareados se descuidan. Cuando las CP son tomadas en cuenta, este sistema en su estado fundamental tiene una energía de excitación del orden de Δ [13].

Si B(N,Z) [14] es la energía de ligadura de un núcleo con Z protones y N neutrones, entonces las energías necesarias para separar el último neutrón y protón respectivamente serán

$$S_n(N,Z) = B(N,Z) - B(N-1,Z)$$
(2)

$$S_P(N,Z) = B(N,Z) - B(N,Z-1)$$
 (3)

En promedio, la energía de separación del neutrón $S_n(N, Z)$ debe ser grande para un núcleo con N par en comparación con un núcleo con impar, debido al pairing de neutrones de energía 2Δ .

Hay una tendencia general para $S_n(N, Z)$ a crecer cuando N crece, pero superpuesta a esta tendencia hay un efecto *par-impar* debido al pairing.

Valores de la energía de pairing para el neutrón, conocido como *gap de pairing*, pueden ser obtenidos de la medida de las energías de separación utilizando la expresión

$$\Delta_n = \frac{1}{4} \{ 2S_n(N,Z) - S_n(N+1,Z) - S_n(N-1,Z) \} =$$

= $\frac{1}{4} \{ B(N-2,Z) - 3B(N-1,Z) + 3B(N,Z) - B(N+1,Z) \}$ (4)

Cuando N es par. De manera similar, para el protón

$$\Delta_n = \frac{1}{4} \{ 2S_p(N,Z) - S_p(N,Z+1) - S_p(N,Z-1) \} =$$

= $\frac{1}{4} \{ B(N,Z-2) - 3B(N,Z-1) + 3B(N,Z) - B(N,Z+1) \}$ (5)

La tendencia general [15] con un número másico A se puede mostrar a través de la expresión

$$\Delta \approx 12/A^{1/2} \ MeV \tag{6}$$

Visibles variaciones locales del gap del pairing con el número de neutrones y protones no se pueden mostrar con el comportamiento de la expresión anterior. Esta correlación, en adicción a la fuerza nucleón-nucleón antes descrita, contribuye a las CP.

3.2.4 Ecuaciones BCS

Cuando estudiamos un núcleo par-par, el hamiltoniano que se considera para el sistema es

$$H = H_{sp} - G \sum_{\nu,m} a_{\nu}^{\dagger} a_{\overline{\nu}}^{\dagger} a_m a_{-m}$$
⁽⁷⁾

donde H_{sp} es el hamiltoniano de partícula independiente, a_v^{\dagger} , $a_{\overline{v}}^{\dagger}$ y a_m , a_{-m} son operadores creación y destrucción respectivamente para estados m y -m que son reversos temporales. El segundo término del hamiltoniano corresponde al término asociado al pairing, donde G es la intensidad de pairing. Cuando se construye un estado de dos partículas, dos huecos próximos al nivel de Fermi menos ligados son llenados a partir de los operadores de creación antes mencionados, vaciándose así los dos espacios que dejan vacantes con los operadores de destrucción. Así las dos partículas por encima del nivel de Fermi y los dos huecos ganan una energía del orden de G que es finita. El espacio del vacío de Hartree-Fock de partida denotado por $|0\rangle$ [16] es inestable frente a la creación de pares y el estado fundamental ha de tener en cuenta la existencia de estos. Así, se propuso para el vacío una función de onda que tenia en cuenta a los pares y que era del tipo

$$|\phi\rangle = \prod_{\nu>0} (U_{\nu} + V_{\nu} a_{\nu}^{\dagger} a_{\bar{\nu}}^{\dagger})|0\rangle$$
(8)

con $U_v^2 + V_v^2 = 1$. Así, cuando V_v es cero, resulta el espacio de inicio de Hartree-Fock, ya que los estados estarían ocupados. Esto es que, el vacío de cuasi-partículas corresponde al estado fundamental de partículas.

Estos dos últimos elementos $U_v^2 y V_v^2$ representan las probabilidades de desocupación y de ocupación respectivamente de los estados de cuasi-partículas. Dan lugar a la idea de que la ocupación de los estados puede ser fraccionaria, poblándose por cuasi-partículas, que es una mezcla de hueco y partícula. $U_v^2 y V_v^2$ serán utilizados posteriormente como parámetros variacionales.

El valor esperado $\langle \phi | H | \phi \rangle$ tiene que ser minimizado con la restricción de que el promedio del número de partículas ha de tener un valor definido [16]. Esto se puede lograr minimizando

$$\left\langle \phi \left| \widehat{H} - \lambda \widehat{N} \right| \phi \right\rangle \tag{9}$$

donde λ es un multiplicador de Lagrange y \hat{N} es el operador número. Físicamente λ representa la energía de Fermi.

El resultado es

$$\langle \phi | H - \lambda N | \phi \rangle = \sum_{\nu > 0} 2V_{\nu}^{2}(\varepsilon_{\nu} - \lambda) - \sum_{\nu \nu' > 0} G_{\nu\nu'} U_{\nu} V_{\nu} U_{\nu'} V_{\nu'} - \sum_{\nu > 0} G_{\nu\nu} | V_{\nu} |^{4}$$
(10)

Aquí se utilizan las relaciones

$$\left\langle \phi \middle| P_{\nu}^{\dagger} \middle| \phi \right\rangle = \left\langle \phi \middle| P_{\nu} \middle| \phi \right\rangle = U_{\nu} V_{\nu} \tag{11}$$

donde $|V_v|^4$ es la contribución Hartree-Fock del campo autoconsistente y $P_v^{\dagger} = \sum_{m>0} (-1)^{v-m} a_{vm}^{\dagger} a_{v-m}^{\dagger}$ y $P_v = \sum_{m>0} (-1)^{v-m} a_{vm} a_{v-m}$ son operadores nuevos de creación y destrucción. El principal efecto de $|V_v|^4$ es el de dotar de una pequeña renormalización a las energías. Esto complica la teoría sin aportar efectos importantes físicamente hablando y es no suele ser tomado en cuenta, ya que el objetivo de la teoría BCS se enfoca a los efectos del pairing.

La condición estacionaria [13] con respecto a las variaciones de U_v y V_v

$$\delta\langle \phi | H - \lambda | \phi \rangle = 0$$

con la restricción $U_v \delta U_v + V_v \delta V_v = 0$, viniendo de la condición de renormalización de U_v y V_v , lleva a la ecuación

$$2(\varepsilon_{\nu} - \lambda)U_{\nu}V_{\nu} - \sum_{\nu'>0} G_{\nu\nu'}(U_{\nu}^2 - V_{\nu}^2)U_{\nu'}V_{\nu'} = 0$$
(12)

Esta ecuación se puede simplificar estableciendo que

$$U_{v} = sen\theta_{v} \qquad ; \qquad 0 \le \theta_{v} \le \pi/2$$

$$V_{v} = cos\theta_{v} \qquad (13)$$

Así

$$2U_{\nu} = 2sen\theta_{\nu} \quad ; \qquad |U_{\nu}|^2 - |V_{\nu}|^2 = cos2\theta_{\nu} \tag{14}$$

Entonces, la ecuación variacional se reduce a

$$2(\varepsilon_v - \lambda) \tan 2\theta_v = \sum_{v'>0} G_{vv'} \operatorname{sen} 2\theta_v \tag{15}$$

Como puede escribirse

$$\tan 2\theta_{\nu} = \frac{\Delta_{\nu}}{\varepsilon_{\nu} - \lambda} \, \operatorname{con} \Delta_{\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\nu' > 0} G_{\nu\nu'} \operatorname{sen} 2\theta_{\nu} = \sum_{\nu' > 0} G_{\nu\nu'} \, U_{\nu'} V_{\nu'}$$

Los ángulos θ_v son reales y están en el rango $0 \le \theta_v \le \pi/2$. Por lo tanto, Δ_v es real y positivo si $G_{vvv} > 0$.

Las ecuaciones en las que aparece la tangente son equivalentes a las relaciones

$$sen2\theta_v = \Delta_v/E_v$$
; $cos2\theta_v = (E_v - \lambda)/E_v$ (16)

donde $E_v = \sqrt{(E_v - \lambda)^2 + {\Delta_v}^2} > 0$

Así
$$\Delta_{\nu} = \frac{1}{2} \sum_{\nu'>0} \frac{G_{\nu\nu'\Delta\nu'}}{\sqrt{(E_{\nu}-\lambda)^2 + {\Delta_{\nu}}^2}}$$
(17)

10

El valor mínimo de la energía al cual corresponde para el conjunto por encima de las ecuaciones variacionales es

$$\langle E \rangle = \sum_{\nu>0} 2 |V_{\nu}|^2 \varepsilon_{\nu} - \frac{1}{4} \sum_{\mu\nu>0} G_{\mu\nu} \frac{\Delta_{\mu}}{E_{\mu}} \frac{\Delta_{\nu}}{E_{\nu}}$$
(18)

Un caso especial e importante es el *modelo constante de pairing*, donde los elementos de la matriz de pairing son $G_{\mu\nu} = G$ para estados de una partícula donde μ y ν se encuentran próximos en un rango sobre el nivel de Fermi, y son cero si se alejan de ese rango. En ese caso $\Delta_{\nu} = \Delta$ y así el conjunto de las ecuaciones dadas en la expresión (17) se reduce una más sencilla y junto con el número de partículas que intervienen en los estados

$$1 = \frac{G}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{1}{\sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2 + {\Delta_{\nu}}^2}}$$
(19)
$$N = \sum_{\nu > 0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2 + {\Delta_{\nu}}^2}} \right]$$
(20)

Estas ecuaciones son bien conocidas como *ecuación del Gap y ecuación del número de partículas* [13], la cual puede considerarse como una ecuación para la energía de Fermi λ . Además, el número de partículas cuenta con una incertidumbre que puede ser expresada por $(\Delta N)^2 = \sum_{\nu>0} \Delta^2 / E_{\nu}^2$. Son punto de partida de gran parte de la teoría de pairing en el núcleo. Ambas ecuaciones han de resolverse de manera simultánea.

Una vez hallados $\Delta y \lambda$ tenemos también

$$|U_{v}|^{2} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_{v} - \lambda}{E_{v}}\right)$$
(21)
$$|V_{v}|^{2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{v} - \lambda}{E_{v}}\right)$$
(22)

que representan las probabilidades de no ocupación y de ocupación respectivamente indicadas al principio del proceso variacional. Podemos expresar Δ como

$$\Delta = G \sum_{\nu > 0} |U_{\nu}|^2 |V_{\nu}|^2$$
(23)

Notar que $|V_{\nu}|^2 > 1/2$ si el estado ε_{ν} está por debajo del nivel de Fermi λ . La energía $\langle E \rangle = 2 \sum_{\nu>0} |V_{\nu}|^2 \varepsilon_{\nu} - \Delta^2/G$ (24)

3.2 Modelos nucleares relativistas. Modelo NL3

3.2.1 Introducción

En esta sección daremos una breve descripción de algunas ideas básicas sobre las cuales se fundamentan los modelos nucleares relativistas (MNR). En primer lugar, justificaremos el uso de estos modelos para estudiar el núcleo y la materia nuclear en general. En segundo lugar comentamos la relación que existe entre este tipo de modelos fenomenológicos (QHD) y QCD. Por último, de forma sucinta, describimos el formalismo del modelo NL3 [8], que nos permite realizar cálculos de estructura nuclear. Este modelo constituye el punto de partida para nuestro trabajo.

3.2.2 Formulación relativista

Una forma habitual de estudiar el núcleo es por medio de la ecuación de Schrödinger a muchos cuerpos, basada en una interacción nucleón-nucleón estática. El planteamiento de los MNR está basado en la ecuación de Dirac, en vez de la de Schrödinger. Una motivación para este cambio proviene del análisis de la interacción nucleón-núcleo y nucleón-nucleón cuyos resultados sugieren la presencia de dos campos muy intensos; uno escalar, atractivo, y el otro vector, repulsivo. Dichos campos exigen un tratamiento relativista. Por otra parte, la suma y la diferencia de los mismos permiten reproducir la propiedad de saturación de la materia nuclear así como el efecto espín-órbita; siendo este último obtenido como resultado de la teoría, a diferencia de lo que ocurre con los modelos no relativistas [17]. Aparte de lo dicho, hay que señalar que existen otros escenarios en los cuales el tratamiento relativista se hace imprescindible; este es el caso de las estrellas de neutrones (densidades muy altas) [18] o las colisiones de iones pesados (altas densidades y temperaturas).



Figura 1: Representación de los distintos estados de la materia según predice la cromodinámica cuántica. El estado de la materia depende de la temperatura y de la densidad neta, representada en el eje de abscisas, que es 0 para el estado del vacío, 1 para el caso de la materia nuclear a T=0 K.

3.2.3 El modelo quark. Relación con QCD

QCD es, al día de hoy, la mejor teoría de la interacción fuerte; sin embargo, no existe un tratamiento perturbativo de la misma en el régimen de energías involucrado en los procesos nucleares. En consecuencia, tanto la interacción *N-N*, como las propiedades de los núcleos todavía no pueden describirse en el marco de QCD. Sin embargo, existe otra forma de abordar el problema; esta es, considerar los nucleones y mesones como los grados de libertad fundamentales, en lugar de los quarks y gluones tal como hace QCD. Éste es el planteamiento de los modelos QHD, a los que podríamos considerar una aproximación fenomenológica de QCD para distancias grandes y energías bajas. Por otra parte, la descripción en términos hadrónicos permite calibrar el modelo al imponer que reproduzca determinados resultados experimentales mediante el ajuste de una serie de parámetros libres. Asimismo, propiedades de QCD, tales como invariancia Lorentz, causalidad o simetría quiral, sirven de guía para construir el lagrangiano de QHD [19].

3.2.4 Formalismo y ecuaciones básicas del modelo NL3

El punto de partida para la construcción de un modelo nuclear relativista es la definición de la densidad lagrangiana; en la que se incluyen tres elementos [20]:

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_0(\Psi, \sigma, \omega_\mu, \rho_\mu, A_\mu) + \mathcal{L}_{int}(mes \acute{o}n - nucle\acute{o}n) - U_{NL}(mes \acute{o}n - mes \acute{o}n)$$
(25)

donde cada término viene definido de la siguiente forma:

$$\mathcal{L}_{0}(\Psi,\sigma,\omega_{\mu},\rho_{\mu},A_{\mu}) = \overline{\varphi}(i\gamma_{\mu}\partial^{\mu} - M)\Psi - \frac{1}{2}m_{\sigma}^{2}\sigma^{2} + \frac{1}{2}(\partial_{\mu}\sigma\partial^{\mu}\sigma) + \frac{1}{2}m_{\omega}^{2}\omega_{\mu}\omega^{\mu} - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + \frac{1}{2}m_{\rho}^{2}\vec{\rho}_{\mu}\vec{\rho}^{\mu} - \frac{1}{4}\vec{G}_{\mu\nu}\vec{G}^{\mu\nu} - \frac{1}{4}H_{\mu\nu}H^{\mu\nu}$$
(26)

$$F_{\mu\nu} \equiv \partial_{\nu}\omega_{\mu} - \partial_{\mu}\omega_{\nu} ; \quad \vec{G}_{\mu\nu} \equiv \partial_{\nu}\vec{\rho}_{\mu} - \partial_{\mu}\vec{\rho}_{\nu} ; \quad H_{\mu\nu} \equiv \partial_{\nu}A_{\mu} - \partial_{\mu}A_{\nu}$$
(27)

$$\mathcal{L}_{int}(mes \acute{o}n - nucle \acute{o}n) = -g_{\sigma}\overline{\varphi}\sigma\varphi - g_{\omega}\overline{\varphi}\gamma^{\mu}\omega_{\mu}\Psi - g_{\rho}\overline{\varphi}\gamma^{\mu}\vec{\rho}_{\mu}\cdot\vec{\tau}\Psi - \frac{1}{2}e\overline{\varphi}\gamma^{\mu}(1+\tau_{3})A_{\mu}\Psi$$
(28)

$$U_{NL} = \frac{1}{3}bM(g_{\sigma}\sigma)^3 + \frac{1}{4}c(g_{\sigma}\sigma)^4$$
⁽²⁹⁾

El primero contiene los campos de los nucleones, mesones y electromagnético libres; en el segundo se encuentran los términos de interacción entre nucleones y mesones, y por último, se introduce un término no lineal que da cuenta de las interacciones mesón-mesón. El término no lineal se introduce para obtener un módulo de compresibilidad adecuado. $M, m_{\sigma}, m_{\omega} y m_{\rho}$ corresponden a las masas del nucleón y de los respectivos mesones que utiliza. Los nucleones vienen descritos como espinores de Dirac, ϕ , que interaccionan por medio del intercambio de mesones virtuales; en nuestro caso, a través del mesón escalar isoescalar, σ , que produce una fuerte atracción; el mesón vector isoescalar, ω , que produce una fuerte repulsión. Aparte de estos mesones también interviene el mesón, ρ , responsable en menor medida de la parte atractiva y de otras propiedades. Por último tenemos el campo electromagnético, A_{μ} .



Figura 2: Potencial entre dos nucleones en función de la distancia al centro del núcleo.

En la aproximación Hartree el núcleo, en su estado fundamental, se contempla como un conjunto de A nucleones con una paridad definida y con simetría esférica, cuyos espinores forman un determinante de Slater.

Aplicando el procedimiento estándar variacional se obtienen las ecuaciones del movimiento de Euler-Lagrange, desglosadas para:

Dirac

$$[-i\alpha \cdot \nabla + V + \beta(M+S)]\Psi_i = \varepsilon_i \Psi_i \tag{30}$$

los nucleones, donde S y V son los potenciales vector y escalar, a su vez definidos por los campos de los mesones de la forma

$$S = g_{\sigma}\sigma \tag{31}$$

$$V = g_{\omega}\omega^{0} + g_{\rho}\tau_{3}\rho_{3}^{0} + \frac{e(1+\tau_{3})}{2}A^{0}$$
(32)

tipo Klein-Gordon para los mesones

$$[-\nabla^2 + m_{\sigma}^2]\sigma = -g_{\sigma}\rho_S - b\sigma^2 - c\sigma^3$$
(33.a)

$$[-\nabla^2 + m_\omega^2]\omega^0 = g_\omega \rho_B \tag{33.b}$$

$$\left[-\nabla^2 + m_{\rho}^2\right]\rho_3^0 = g_{\rho}\rho_3 \tag{33.c}$$

y para la del campo electromagnético

$$-\nabla^2 A^0 = e\rho_c \tag{33.d}$$

donde *e* es la constante de estructura fina, y de cuya solución se obtienen las propiedades del núcleo, tales como esquema de niveles de los estados, radios nucleares etc. Para la resolución necesitamos las densidades de los distintos campos. Estos son

La densidad escalar
$$\rho_S = \sum_{i=1}^{A} \overline{\Psi}_i \Psi_i$$
 (34.a)

La densidad bariónica
$$\rho_B = \sum_{i=1}^{A} \Psi_i^{\dagger} \Psi_i$$
 (34.b)

La densidad iovectorial
$$\rho_3 = \sum_{i=1}^{Z} \Psi_i^{\dagger} \Psi_i - \sum_{i=1}^{N} \Psi_i^{\dagger} \Psi_i$$
 (34.c)

La densidad de carga $\rho_c = \sum_{i=1}^{A} \Psi_i^{\dagger} \frac{(1+\tau_3)}{2} \Psi_i$ (34.d)

Estas ecuaciones son muy complicadas, por lo que requieren resolverse numéricamente no sin antes introducir una serie de aproximaciones; a saber: 'No sea', lo que equivale a no tener en cuenta la polarización del vacío y 'Mean Field', que trata a los campos mesónicos y fotónico como campos clásicos, es decir, se ignoran sus fluctuaciones [21].

Los parámetros de nuestro modelo son: la masa del mesón escalar m_{σ} ; las constantes de acoplamiento de los mesones con los nucleones, g_{σ} , $g_{\omega} y g_{\rho}$ junto con los parámetros *b* y *c* que entran en el término no lineal. Los valores de estos parámetros se obtienen por ajuste a datos experimentales; en nuestro caso, se utilizaron los radios cuadráticos medios de carga y energías de ligadura por partícula de los núcleos: ¹⁶O, ⁴⁰Ca y ²⁰⁸Pb. Una vez fijados los valores de los mismos estamos en condiciones de calcular la estructura de cualquier otro núcleo.

A continuación se muestran los valores de estos parámetros así como sus predicciones para algunos observables de materia nuclear.

m_{σ} / MeV	$g_{\sigma}^2/4\pi$	$g_{\omega}^2/4\pi$	$g_{\rho}^2/4\pi$	b	С
504.34	8.18	13.02	1.67	2.14×10^{-3}	2.76×10^{-3}

Tabla 1: Valores de los parámetros utilizados en el modelo NL3.

Todos los cálculos de los núcleos estudiados mediante el modelo NL3 se efectuaron con estos parámetros fijos.

El procedimiento de cálculo es autoconsistente; es decir, los campos escalar y vector se obtienen de la densidad escalar y bariónica respectivamente, pero éstas a su vez requieren el conocimiento de las soluciones de la ecuación de Dirac que también exigen la definición de estos campos. Para iniciar el proceso se definen unos potenciales escalar y vector, de tipo Woods-Saxon. Con estos potenciales resolvemos la ecuación de Dirac y obtenemos las funciones de onda de la pequeña y gran componente, así como los valores propios de energía. Estos resultados permiten calcular las densidades bariónica y escalar que aparecen en los términos fuente de las ecuaciones de Klein-Gordon de los mesones, y por tanto resolverlas, para obtener unos nuevos potenciales escalar y vector; a partir de aquí se vuelve al punto de partida y se repite todo el proceso hasta alcanzar la convergencia.

4. Programa de cálculo de estructura nuclear

4.1 Introducción

La resolución de las ecuaciones BCS constituye uno de los objetivos de este trabajo. Todo el proceso debe ser cuidado en detalle debido a que el cálculo final ha de converger, con el añadido de que la resolución de las ecuaciones BCS es para protones y neutrones por separado y, a su vez, ambas deben converger dentro del programa de cálculo de estructura nuclear. Se trata en definitiva de la resolución de dos métodos iterativos anidados, y la posterior aplicación al cálculo de la estructura nuclear en diversos escenarios.

4.2 Ecuaciones BCS para protones y neutrones

Como se cita en la introducción las ecuaciones BCS son dos ecuaciones no lineales acopladas de la forma

$$1 = \frac{G_{n,p}}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{1}{\sqrt{\left(\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}\right)^2 + \Delta_{n,p}^2}}$$
(1)

$$N_{n,p} = \sum_{\nu>0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}}{\sqrt{\left(\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}\right)^2 + \Delta_{n,p}^2}} \right]$$
(2)

donde los subíndices *n*,*p* denotan que el sistema corresponde a neutrones o a protones respectivamente.

Lo que se pretende con la resolución de estos sistemas es observar cómo influye cada uno sobre el modelo NL3. Se puede especificar que el modelo NL3 es aquel que se referirá al programa de cálculo antes mencionado.

Como vemos en las ecuaciones tendremos como datos de entrada para su resolución las constantes de pairing $G_{n,p}$, los números de partículas que participan en el proceso de resolución $N_{n,p}$ y los espectros de energías involucrados $\varepsilon_{v_{n,p}}$. Como producto final obtendremos los valores de la energía de Fermi y del gap en cada sistema. En total para ambos se obtendrán cuatro valores de las variables, dos energías de Fermi, λ_n y λ_p , y dos valores del gap, Δ_n y Δ_p . Una vez obtenidos estos valores estamos en condiciones de poder calcular las probabilidades de ocupación de los estados involucrados en el proceso de pairing, y que serán calculadas a partir de las ecuaciones, para neutrones y protones de la forma

$$\left| U_{\nu_{n,p}} \right|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}}{E_{\nu_{n,p}}} \right)$$
(3)

$$\left| V_{\nu_{n,p}} \right|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}}{E_{\nu_{n,p}}} \right)$$
(4)

donde

$$E_{v_{n,p}} = \sqrt{\left(\varepsilon_{v_{n,p}} - \lambda_{n,p}\right)^2 + {\Delta_{v_{n,p}}}^2} \tag{5}$$

para ambos tipos de partículas

Estas probabilidades de ocupación serán fundamentales en el proceso de cálculo de la estructura nuclear relativista, puesto que van a modificar los índices de ocupación de determinados estados del espectro de niveles.

4.3 Definición de $G_n y G_p$. Elección de la ventana de estados

Para el cálculo de las ecuaciones BCS es necesario conocer el valor de G, la constante de interacción de pairing. Esta aparece en la ecuación del gap, y da una idea de la intensidad con la que la interacción de pairing se produce en el sistema. La intensidad de pairing en protones ha de ser considerada menor que para neutrones por la repulsión coulombiana. Así, hemos definido ambas constantes de la forma [22], [23]

$$G_n = \frac{30}{4} MeV \tag{6}$$

$$G_p = \frac{20}{4} MeV \tag{7}$$

donde *A* corresponde al número másico del núcleo. La constante de pairing no está definida de forma muy precisa, pero se suele tomar en estas cantidades. Su estimación es un problema abierto, debido a que no hay aun una parametrización específica que de cuenta de forma particular en cada caso moviéndonos dentro de la carta de núcleos, sino de una forma global.

Como paso previo a la resolución de las ecuaciones BCS elegimos un conjunto de niveles para cada partícula en torno al nivel de Fermi, puesto que son los que más van a contribuir a la solución de las ecuaciones. Este conjunto de niveles lo vamos a denominar ventana. Está constituida por estados llenos, parcialmente ocupados y vacíos. Por lo tanto, el espectro de niveles del núcleo queda dividido en dos grupos, los de la ventana y los que quedan fuera de esta.

Al finalizar el cálculo, el numero N para protones y neutrones se "repartirá" en forma fraccionaria sobre todos los niveles de la ventana, en lo que se denominaron cuasi-partículas. En definitiva, los estados involucrados en el proceso BCS pasarán a tener ocupación fraccionaria.

4.4 Método utilizado en el desarrollo del modelo

En primer lugar, como ya se ha visto en el apartado anterior, tenemos que resolver dos sistemas de dos ecuaciones no lineales acopladas y luego se introducen dentro de otro método iterativo del modelo NL3. Entonces, este proceso consta de dos partes. La resolución de las ecuaciones BCS, y su posterior introducción en el cálculo de estructura nuclear relativista. En este apartado nos ocupamos de la primera etapa.

Las ecuaciones BCS, debido a sus características de estructura no lineal y su acoplamiento, requieren de un método iterativo, desde el cual, dado un valor inicial de las variables a calcular vaya obteniendo sucesivas aproximaciones al valor anterior, hasta llegar a una convergencia prefijada. Bajo esa idea, se ha decidido utilizar el método de Newton-Raphson [24], [25] para sistemas de ecuaciones no lineales. Llegamos a la conclusión de que es el método más eficaz y eficiente. Se comprobó que la resolución de las ecuaciones BCS por otro método de aproximaciones sucesivas no era eficiente, ya que había que acercarse a la solución desde distintos puntos en el plano formado por las variables λ y Δ . Aparte de lo costoso de la búsqueda, podían darse mínimos locales, es decir, localizar una solución que no era la óptima. Este es un aspecto que se evita al utilizar el método de Newton-Raphson.

Vemos una breve descripción del método.

Nos centramos en la búsqueda de las raíces de una función $F_j = F_j(x_1, x_2, ..., x_N)$, donde intervienen N variables, con i = 1, 2, ..., N.

Decimos que x denota el vector completo de valores x_i y F denota el vector completo de funciones F_i . En el entorno de x, cada una de las funciones F_i se puede ampliar en serie de Taylor

$$F_j(x + \delta x) = F_j(x) + \sum_{i=1}^N \frac{\partial F_i}{\partial x_i} \delta x_i + O(\delta x^2)$$
(8)

La matriz de derivadas parciales que aparecen en la ecuación anterior es la matriz Jacobiana

$$J_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial x_j} \tag{9}$$

Así, en notación matricial

$$F_j(x + \delta x) = F(x) + J \cdot \delta x + O(\delta x^2)$$
(10)

Al no considerar los términos de orden superior y δx^2 y mediante el establecimiento de $F_i(x + \delta x) = 0$, se obtiene un conjunto de ecuaciones lineales para las correcciones de δx que modifica cada función más cercano al cero simultáneamente, a razón de

$$J \cdot \delta x = -F \tag{11}$$

Las correcciones se añaden a continuación a la solución vector

$$x_{nueva} = x_{anterior} + \delta x \tag{12}$$

El proceso se repite hasta que se alcanza una solución donde

$$|x_{nueva} - x_{anterior}| \le tolerancia$$

donde esta tolerancia será un valor numérico elegido a voluntad tras comprobar como influye el grado de convergencia sobre los resultados finales. Así, x_{nueva} de la última iteración será la solución final.

Para el caso que nos ocupa, el orden de la dimensión que de N es dos, así como el número de funciones F, por lo que tendremos un sistema donde

$$x_{1} = \lambda_{n,p} \quad ; \quad F_{1} = 1 - \frac{G_{n,p}}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{1}{\sqrt{\left(\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}\right)^{2} + \Delta_{n,p}^{2}}}$$
(13)

$$x_{2} = \Delta_{n,p} \quad ; \quad F_{2} = N_{n,p} - \sum_{\nu > 0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}}{\sqrt{\left(\varepsilon_{\nu_{n,p}} - \lambda_{n,p}\right)^{2} + \Delta_{n,p}^{2}}} \right]$$
(14)

Cuando el programa converge puede mostrar dos tipos de soluciones del gap $\Delta_{n,p}$. La primera es la solución trivial, para la cual se anula el valor de gap, por lo que a efectos del pairing resulta como si no hubiera contribuido al cálculo en el modelo NL3. El otro tipo es la solución superconductora, para la cual el valor del gap toma un valor finito y por lo tanto el pairing ha influido en el cálculo de la estructura nuclear.

El modelo NL3 nos suministra el espectro de niveles, $\varepsilon_{v_{n,p}}$, cuyos valores nos sirven para seleccionar los valores iniciales de $\lambda_{n,p}$ y $\Delta_{n,p}$. A continuación, se toman los valores de las energías de la ventana seleccionada para protones y para neutrones y se suministran a las ecuaciones BCS de los programas en Matlab y Fortran. Así, con una tolerancia definida ambos programas, de protones y de neutrones, convergen hasta obtener unos valores finales de $\lambda_{n,p}$ y de $\Delta_{n,p}$.

4.5 Convergencia y autoconsistencia del programa

Los programas independientes en Matlab y Fortran se realizaron en su momento como test previo para que nos proporcionaran la idea de la bondad de estas ecuaciones. Una vez comprobado este aspecto se introdujo el código de resolución de las ecuaciones BCS en el modelo NL3 puesto que tiene que conocer el esquema de niveles y los datos necesarios para su desarrollo.

El programa basado en el modelo NL3 posee una rutina donde se aloja el método autoconsistente de Hartree. De forma breve se puede describir el proceso que realiza de la siguiente manera:

Se resuelve la ecuación de Dirac, ecuación (30), a partir de unos potenciales iniciales de partida que le proporcionamos, denominados de Wood-Saxon, en los potenciales escalar y vector de las ecuaciones (31) y (32) del bloque anterior. Así estamos en posesión de la función de onda Ψ_i y de las energías de los estados ε_i . A continuación el programa utiliza las funciones de onda para hallar las densidades de las ecuaciones (34), y cuando dispone de ellas resuelve las ecuaciones de Klein-Gordon (33) y obtiene los potenciales de los mesones σ , ω^0 , ρ_3^0 y del campo electrostático A^0 . Finalmente con estos últimos vuelve a calcular los potenciales vector y escalar de las ecuaciones (31) y (32) para repetir de nuevo el ciclo.

La inclusión de los procesos iterativos de BCS para protones y neutrones se realiza "ad hoc", es decir, se inserta concretamente al final de la rutina antes descrita del modelo NL3. Esto se debe a que la rutina requiere conocer el valor de los índices de ocupación de los estados de cada partícula para calcular las energías ε_i , calculados a partir de los $\lambda_{n,p}$ y $\Delta_{n,p}$ de las ecuaciones BCS. Así se completa el ciclo del programa.

A continuación muestro un sencillo esquema de funcionamiento de la rutina principal junto con las ecuaciones BCS implementadas.



Figura 1: Esquema de funcionamiento de la rutina del programa basado en el modelo NL3 incluidas las ecuaciones BCS.

La implementación del código de las ecuaciones BCS requiere un manejo de las variables que intervienen adecuado. Un aspecto clave fue el de asegurar la convergencia del método de Newton-Raphson, el cual, como ya se comentó, requiere introducir unos valores iniciales de las variables que se quieren hallar, en este caso $\lambda_{n,p}$ y $\Delta_{n,p}$. En la primera iteración se introducen de forma manual, como es habitual en estos métodos. Es en las siguientes iteraciones cuando el programa asigna a los valores iniciales del método de Newton-Raphson los valores de $\lambda_{n,p}$ y $\Delta_{n,p}$ obtenidos en la iteración anterior. Estos pueden estar muy alejados de los valores que aseguren la convergencia de las ecuaciones BCS. Por ello, al ejecutar el programa se deja que la rutina autoconsistente del modelo NL3 realice varias iteraciones sin tener en cuenta a las ecuaciones BCS hasta que se logre una convergencia en las energías de los estados.

El programa queda construido de tal manera que podamos habilitar o deshabilitar las ecuaciones BCS de modo que intervengan protones y neutrones simultáneamente, que no intervenga ninguno o ambos por separado.

4.6 Resultados sobre el programa de estructura nuclear

A continuación mostramos una salida del programa de estructura nuclear. Como ejemplo la del ⁸⁴Kr en el cual están las ecuaciones BCS desactivadas.



El núcleo se configura proporcionando al programa el número de estados totales (NOS) y el de estados totales de neutrones (NPO), así como la ocupación de estos. Además, se observa la configuración inicial de las ventanas de cada nucleón. A continuación se muestra la salida para el caso en que las ecuaciones BCS para protones y neutrones están activadas.



Se apreciará principalmente cambios en las probabilidades de ocupación de los estados de las ventanas y la ocupación de estas. Cabe adelantar que cambiarán las energías de la totalidad de los estados y no sólo de los de las ventanas.

De forma general, al introducir el BCS en el proceso, aparte de los principales cambios indicados en la salida, también han cambiado los radios cuadráticos medios de todos los estados, y la energía de ligadura por nucleón ha aumentado, lo que indica que el término de pairing hace que el sistema se encuentre más ligado, y por lo tanto más estable.

Aparte de estos datos de salida, dotamos al programa de cálculo de estructura nuclear de una serie de órdenes para que cree en lenguaje Matlab unos programas específicos con el fin de que nos proporcionen información gráfica sobre los potenciales de los mesones y del campo electrostático, así como de las densidades de todos los estados del núcleo. Estos procedimientos gráficos son esenciales para el análisis físico que veremos posteriormente.

5. Resultados

5.1 Introducción

Perseguimos el objetivo de estudiar el efecto de las CP en términos más intuitivos de los que proporcionan las ecuaciones BCS.

Nuestro análisis del efecto del pairing sobre la estructura nuclear está basado en la modificación que estas correlaciones introducen en los potenciales nucleares, y en consecuencia en las distribuciones espaciales de los estados de los nucleones. La diferencia entre el potencial total cuando las ecuaciones BCS intervienen y cuando no será la herramienta de análisis.

5.2 Núcleos estudiados

Las condiciones idóneas para nuestro análisis requieren de la utilización de núcleos esféricos, estáticos y sin vibraciones en el estado fundamental. [26]

De entre todos los núcleos estudiados, habiendo muchos disponibles, van a mostrarse los resultados de la estructura nuclear mediante el modelo NL3 de dos de ellos que cuentan con diferentes configuraciones. Es importante que cumplan una serie de características para que la interacción de pairing se manifieste. Esto es debido a que en el caso de que se produzcan soluciones triviales en el cálculo de las ecuaciones BCS el efecto del pairing es nulo, situación que ha de ser evitada ya que la herramienta de estudio es la diferencia del potencial con BCS y sin BCS. Para asegurar que no sea así se escogen aquellos que no tenga capas cerradas ni cuenten con número mágico en el número de protones, neutrones o ambos a la vez. Utilizamos el $^{128}_{52}$ Te y el $^{88}_{36}$ Kr, que cuentan con capas semillenas en protones y neutrones. A priori garantizan que no se produzcan soluciones triviales y así el gap sea no nulo. Elegimos esos como ejemplo ilustrativo de entre todos los núcleos que hemos analizado.

En primer lugar nos ocupamos del núcleo $^{128}_{52}$ Te. Dicho núcleo cuenta con los siguientes niveles:

Niveles de neutrones: $1s_{1/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$, $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$, $1d_{3/2}$, $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$, $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$, $1h_{11/2}$, $2f_{7/2}$, $1h_{9/2}$ Niveles de protones: $1s_{1/2}$, $1p_{3/2}$, $1p_{1/2}$, $1d_{5/2}$, $2s_{1/2}$, $1d_{3/2}$, $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$, $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$ De entre todos los niveles para cada nucleón, los seis últimos formarán parte de sus respectivas ventanas. Esta elección está basada en el espectro de energías y en el índice de ocupación de los estados.

5.3 Potencial efectivo

Dotamos al programa de cálculo basado en el modelo NL3 de una serie de órdenes en lenguaje Matlab con el fin de que nos proporcionen información gráfica sobre potenciales de los mesones y del campo electrostático, así como de las densidades de todos los estados de los nucleones en función de la distancia al centro del núcleo. Tal como vimos, el potencial nuclear surge del intercambio de mesones entre los nucleones. En el modelo NL3 utilizado será a través del mesón escalar isoescalar, σ , que produce una fuerte atracción; el mesón vector isoescalar, ω , que produce una fuerte repulsión. Aparte de estos mesones también interviene el mesón, ρ , responsable en menor medida de la parte atractiva y de otras propiedades. Y por último el potencial de coulomb, que experimentarán las partículas cargadas, los protones. A continuación, en la figura1, se representan los cuatro potenciales.



Figura 1: Representación de los potenciales de intercambio de mesones σ , ω , ρ y de coulomb para un núcleo de $^{128}_{52}$ Te. Se observa claramente el comportamiento antes descrito para cada mesón implicado dentro del modelo NL3 y para el campo coulombiano.

Los potenciales de los mesones σ y ω son muy parecidos en magnitud, del orden de las centenas de MeV pero opuestos en signo, así que si sumamos todos los potenciales obtenemos un potencial total en función de la distancia al centro del núcleo de la forma mostrada en la figura 2.



Figura 2: Representación del potencial que resulta de la suma de los cuatro potenciales, tres para los mesones σ , ω , ρ y uno para el coulombiano, del modelo NL3.

donde resulta un potencial atractivo en la zona más interna y repulsivo en la parte externa, principalmente debido a la barrera coulombiana. Además, es un potencial fijo para cada nucleón. En consecuencia los nucleones se mueven independientemente, en un potencial promedio, el cual es generado por ellos mismos.

Estas representaciones de los potenciales corresponden al caso en que no están habilitadas las ecuaciones BCS en el modelo NL3. Dada la naturaleza del pairing, siendo meramente una interacción perturbativa, la forma en que trataremos será representando la diferencia $V_{TBCS} - V_T$, donde V_{TBCS} es el potencial total cuando el pairing se encuentra habilitado y V_T es el potencial total sin el pairing activo. Así se podrá dar cuenta de su influencia en el espacio. Como paso previo representamos de forma separada las diferencias de los potenciales para cada mesón.

5.4 Diferencia de potencial total y de la densidad de estados con respecto a la interacción de pairing.

Los estados que van a tomar parte en la interacción de pairing (estados de la ventana) son:

- para neutrones: $1g_{7/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$, $1h_{11/2}$, $2f_{7/2}$, $1h_{9/2}$
- para protones: $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$, $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$

En la figura 3 representamos la variación de los potenciales de los mesones σ , ω , ρ y de la interacción coulombiana de forma separada debido a las CP.



Figura 3: Representación de $V_{\sigma,\omega,\rho,C_{BCS}} - V_{\sigma,\omega,\rho,C}$ en función de la distancia al centro del núcleo.

Se observa que las diferencias de los potenciales de los mesones σ y ω son prácticamente iguales en magnitud pero opuestos en signo, por lo que prácticamente se cancelan mutuamente. La variación del potencial coulombiano es casi nula, y la diferencia de potenciales del mesón ρ es significativamente menor que las de σ y ω por separado. Su comportamiento se muestra en la figura 4.



Figura 4: Representación de $V_{\rho_{BCS}} - V_{\rho}$ en función de la distancia al centro del núcleo.

La figura 5 muestra como influye cada mesón en la diferencia $V_{T_{BCS}} - V_{T}$.



Figura 5: Se muestran las diferencias de los potenciales del mesón ρ (en magenta), la suma de las diferencias de los potenciales de σ y ω (azul) y la diferencia del potencial total (negro).

Se observa como el mesón ρ contribuye prácticamente a la mitad del potencial total debido al pairing. Este es un resultado sorprendente debido a la gran diferencia entre la magnitud del potencial de ρ y los potenciales de σ y ω , siendo de unidades de MeV en el primer caso, a los cientos de MeV para el segundo como se muestra en la figura 1. A la vista de este resultado podemos decir que el mesón ρ juega un rol fundamental en la interacción de pairing.



Figura 6: Representación de la diferencia de $V_{T_{BCS}} - V_T$ en función de la distancia al centro del núcleo. La zona rayada indica que la ligadura disminuye cuando se habilitan las CP al modelo NL3, mientras que la zona cuadriculada indica que aumenta la ligadura debido al pairing.

Se aprecia como existen ciertas regiones próximas al centro o a la superficie del núcleo que dan una idea de cómo el sistema gana o pierde ligadura. Si tenemos en cuenta el criterio de signos dentro de la diferencia de los potenciales siendo $V_{T_{BCS}} - V_T$, y que como indica la figura 2 los potenciales $V_{T_{BCS}}$ y V_T son negativos en la región comprendida entre aproximadamente 0 y 8 *fin*, diferenciamos entre las situaciones donde $V_{T_{BCS}} - V_T > 0$, si $|V_{T_{BCS}}| < |V_T|$ y $V_{T_{BCS}} - V_T < 0$, si $|V_{T_{BCS}}| > |V_T|$.

Así podemos tener una idea de cuando el sistema gana o pierde ligadura debido al pairing en las diferentes regiones. Cuando $|V_{T_{BCS}}| > |V_T|$ el sistema gana ligadura, y cuando $|V_{T_{BCS}}| < |V_T|$ la pierde.

De esta manera, la diferencia $V_{T_{BCS}} - V_T$ nos muestra de forma muy clara el efecto del pairing.

Como ya vimos en la salida de resultados de la sección anterior, al introducir el pairing en el modelo NL3 se producía un reparto de cuasi-partículas en los niveles dentro de las ventanas seleccionadas. Además se producían cambios en las energías y en los radios cuadráticos medios de la totalidad de los estados del núcleo, ya estuvieran en las ventanas o fuera de ellas. Ello parece indicar que se produce una redistribución de cuasi-partículas entre los estados de las ventanas, y en los estados fuera de estas, donde la probabilidad de ocupación de los estados permanece constante, sólo se producen cambios en la distribución espacial. Partiendo de este hecho, es de suponer que la tendencia sea tal que donde más ligadura gana el sistema es donde más cuasi-partículas pueden ser alojadas, es decir, en los estados semillenos y vacíos de la ventana, y los estados que ceden partículas estarán más bien en la zona donde se pierda ligadura.

Representamos las diferencias de las densidades de los estados de la ventana de neutrones y de protones con y sin BCS.



Figura 7: Representación de $\rho_{ventana_{BCS}} - \rho_{ventana}$ en función de la distancia al centro del núcleo. Los estados de protones apenas se aprecian, lo que da una idea de la diferencia de magnitud de los cambios producidos respecto a los neutrones.

	En la siguient	e tabla se	muestran	las var	aciones	de c	cuasi-pa	rtículas	en	los	niveles
de l	as ventanas, pa	ra neutron	es y para p	rotone	s respect	tivan	nente.				

	1	1	r	1
Estados de	Partículas sin	Energía sin	Partículas con	Energía con
neutrones	BCS	BCS / MeV	BCS	BCS / MeV
$1g_{7/2}$	8	-12.665	7.8683	-10.837
3 <i>s</i> _{1/2}	2	-8.6831	1.5545	-12.696
$2d_{3/2}$	4	-9.1068	3.4206	-8.7081
$1h_{11/2}$	6	-8.0871	6.9971	-9.1444
$2f_{7/2}$	0	-1.5374	0.0776	-8.0747
$1h_{9/2}$	0	-0.95731	0.0820	-1.4922
Estados de				
protones				
2 <i>p</i> _{1/2}	2	-14.900	1.9990	-14.974
$1g_{9/2}$	10	-13.105	9.9914	-13.266
$2d_{5/2}$	0	-5.0545	0.0329	-4.9942
$1g_{7/2}$	2	-6.9566	1.9670	-7.1268
3s _{1/2}	0	-2.5543	0.0024	-2.3413
2d _{3/2}	0	-3.2926	0.0074	-3.2735

Tabla 1: Variación del número de partículas y de las energías en los estados de las ventanas de neutrones y protones.

En vista a los datos de la tabla 1y teniendo en cuenta la expresión que proporciona la probabilidad de ocupación (ec. 21 de la primera sección), podemos llegar a la conclusión de que los niveles con energías próximas a la energía de Fermi, que en este caso tiene el valor de $\lambda_n = -7.86 \text{ MeV}$ son los que más cambian su población, y si están más ligados tenderán a ganar cuasipartículas, ya que el valor de $|V_v|^2$ será mayor que $\frac{1}{2}$.

Considerando la densidad total, ρ_T , en función de la distancia al centro del núcleo como la densidad que resulta de sumar todas las densidades de los estados para dar cuenta de las redistribuciones, al hacer la diferencia $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T$, obtendremos un resultado que estará directamente relacionado con la figura 6.



Figura 8: Representación de la diferencia de $\rho_{T_{BCS}}$ y ρ_T en función de la distancia al centro del núcleo. Se han señalado las áreas donde los estados $3s_{1/2}$, $2d_{3/2}$ y $1h_{11/2}$ son los principales estados que contribuyen.

Las densidades totales $\rho_{T_{BCS}}$ y ρ_T son siempre positivas, por lo que $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T > 0$, si $\rho_{T_{BCS}} > \rho_T$ y $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T < 0$, si $\rho_{T_{BCS}} < \rho_T$.

La función $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T$ de la figura 8 tiene un comportamiento simétrico con respecto a la función $V_{T_{BCS}} - V_T$ de la figura 6.

La figura 8 queda configurada prácticamente por los tres estados más próximos al nivel del Fermi, que son el $3s_{1/2}$ para la zona más interna, seguida del $2d_{3/2}$, donde el sistema pierde ligadura, y $1h_{11/2}$ en la zona donde gana ligadura. Donde pierde ligadura, los estados $3s_{1/2}$ y $2d_{3/2}$ han de ceder partículas para que ello se produzca. De hecho este estado $3s_{1/2}$ gana mucha energía de ligadura tal y como muestra la tabla 1, por lo que las partículas que aun conserva estarán fuertemente ligadas. De esta manera el pairing dota de mayor ligadura al sistema, principalmente a costa del estado $3s_{1/2}$.

El estado $1g_{7/2}$ también cede, pero en mucha menor cantidad, ya que es un estado distante del nivel de Fermi. La zona donde gana ligadura el sistema se debe principalmente al estado $1h_{11/2}$, mientras que los dos estados menos ligados y vacíos en inicio, el $2f_{7/2}$ y el $1h_{9/2}$ apenas reciben cuasi-partículas. Esto se debe a que están bastante alejadas en cuanto a energía se refiere del nivel de Fermi.

A partir de los resultados de la figura 9 concluimos que hay tres estados próximos al nivel de Fermi que tendrán un papel dominante con respecto al resto en la interacción de pairing



Figura 9: Representación de la diferencia de $V_{T_{BCS}} - V_T$ en función de la distancia al centro del núcleo. La ligadura ofrece una idea de cómo serán las principales redistribuciones de partículas en los estados más influyentes.

El estudio del ¹²⁸Te muestra como los estados de la ventana de neutrones son los que más contribuyen a la interacción de pairing. El hecho de que haya un exceso de neutrones sobre protones parece ser el responsable de que la diferencias $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T y$ $V_{T_{BCS}} - V_T$ queden configuradas como muestran las figuras 8 y 9 a merced de los estados de la ventana de neutrones, la cual experimenta el mayor intercambio de cuasipartículas entre los estados adyacentes al nivel de Fermi.

Teniendo en cuenta los datos de la tabla 1, los estados más alejados, tales como los inicialmente vacíos, el $2f_{7/2}$ y el $1h_{9/2}$ apenas han recibido cuasipartículas, y es que se encuentran distantes a los niveles más activos a efectos del pairing. Es por ello que mostramos los resultados para otro núcleo donde el exceso de neutrones sobre protones no sea tan alto y los niveles de las ventanas se encuentren más próximos los unos de otros. A continuación, trataremos otro núcleo, el ${}^{88}_{36}$ Kr, siguiendo el mismo procedimiento anterior. Dicho núcleo presenta una configuración que difiere significativamente de la del 128 Te, lo que da la oportunidad de experimentar en otros escenarios.

Ahora contamos con una ventana de niveles con los estados siguientes:

- para neutrones: $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$, $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$, $3s_{1/2}$
- para protones: $1f_{7/2}$, $2p_{3/2}$, $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$, $1g_{9/2}$, $2d_{5/2}$

Es interesante ver como varían los potenciales de los mesones σ, ω, ρ y de la interacción coulombiana de forma separada cuando se aplican al modelo NL3 las ecuaciones BCS y cuando no al igual que en el núcleo anterior. La figura 10 muestra como es esta variación.



Figura 10: Representación de $V_{\sigma,\omega,\rho,C_{BCS}} - V_{\sigma,\omega,\rho,C}$ en función de la distancia al centro del núcleo.

Vemos como el comportamiento que siguen las diferencias de los potenciales de los mesones σ y ω es similar al del núcleo ¹²⁸Te, son prácticamente iguales en magnitud pero opuestos en signo, por lo que prácticamente se cancelan mutuamente. También en este caso la variación del potencial coulombiano es casi nula y la diferencia de potenciales del mesón ρ sigue siendo significativamente menor a las de σ y ω por separado.

En la figura 11 vemos como influye cada mesón en la diferencia $V_{T_{BCS}} - V_T$. Se observa que el mesón ρ sigue desempeñando un papel importante en la contribución a la diferencia de potencial total.



Figura 11: Se muestran las diferencias de los potenciales del mesón ρ (en magenta), la suma de las diferencias de los potenciales de σ y ω (azul) y la diferencia del potencial total (negro).





Figura 12: Representación de la diferencia de $V_{T_{BCS}} - V_T$ en función de la distancia al centro del núcleo. La zona rayada indica que la ligadura disminuye cuando se habilitan las CP al modelo NL3, mientras que la zona cuadriculada indica que aumenta la ligadura debido al pairing.

Representamos en la figura13 las diferencias de las densidades de los estados de la ventana de neutrones y de protones con y sin BCS. Veremos si en este núcleo, donde la diferencia entre neutrones y protones no es tan amplia como en el anterior núcleo estudiado, la ventana de protones juega un papel a destacar o similar al de los neutrones en la configuración de la diferencia de las densidades.



Figura 13: Representación de $\rho_{ventana_{BCS}} - \rho_{ventana}$ en función de la distancia al centro del núcleo. Los estados de protones, salvo dos de ellos (rodeados en círculo), el $1f_{7/2}$ (línea de puntos rojos) y el $2p_{1/2}$ (línea de puntos negros) apenas se aprecian, lo que da una idea de la diferencia de magnitud de los cambios producidos respecto a los neutrones.

Vemos en la figura 13 que los estados de la ventana de protones apenas participan en la configuración de la diferencia $\rho_{ventanaBCS} - \rho_{ventana}$. Los estados fuera de las ventanas también sufren cambios con el pairing, pero son de una magnitud mucho menor a los cambios sufridos por los estados de las ventanas. Pero es preciso señalar que los estados internos, $1s_{1/2}$ y $2s_{1/2}$ para protones y neutrones son los más sensibles a cambios en su distribución espacial, a pesar de que no cambia su ocupación de partículas. Lo atribuimos a que carecen de barrera centrífuga.

Estados de	Partículas sin	Energía sin	Partículas con	Energía con
neutrones	BCS	BCS / MeV	BCS	BCS / MeV
$1f_{5/2}$	6	-16.513	5.9860	-16.620
2p _{1/2}	2	-13.235	1.9908	-13.153
$1g_{9/2}$	10	-10.405	9.8999	-10.411
$2d_{5/2}$	2	-3.8686	1.1513	-3.8532
$1g_{7/2}$	0	-3.1270	0.7949	-3.2131
$3s_{1/2}$	0	-3.0953	0.1770	-3.0874
Estados de				
protones				
$1f_{7/2}$	8	-19.350	7.9948	-19.424
2p _{3/2}	2	-11.204	1.9679	-11.138
$1f_{5/2}$	6	-13.372	5.9558	-13.572
2 <i>p</i> _{1/2}	0	-9.9076	0.0449	-9.7867
$1g_{9/2}$	0	-7.4614	0.0345	-7.5788
$2d_{5/2}$	0	0.45235	0.0020	0.52302

La siguiente tabla muestra las variaciones de cuasi-partículas en los niveles de las ventanas, para neutrones y para protones respectivamente.

Tabla 2: Variación del número de partículas y de las energías en los estados de las ventanas de neutrones y protones para el ⁸⁸Kr.

En la tabla 2 se observa como los estados más externos de neutrones, o menos ligados, son los que han sido más influenciados por el pairing, ya que prácticamente el número de cuasi-partículas que ha cedido el estado $2d_{5/2}$ han sido alojados en los dos estados que sin el pairing activado estaban vacíos, el $1f_{7/2}$ y el $2p_{1/2}$. La energía de Fermi tiene en este caso el valor de $\lambda_n = -4.75 MeV$, vemos en la tabla que efectivamente los estados más implicados en el pairing tienen energías en torno al nivel de Fermi, por lo que una vez más se ratifica lo anteriormente visto en el otro núcleo estudiado.

El pairing en los protones no se manifiesta en la misma magnitud que en los neutrones, por lo que el aporte de estos a la diferencia de las densidades totales no es tan relevante. Los datos anteriores evidencian que la diferencia de las densidades $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T$ se podrá configurar a partir de los estados más significativos a efectos del pairing, tal y como sucedía en el anterior núcleo estudiado. Se muestra en la figura 14.



Figura 14: Representación de la diferencia de $\rho_{T_{BCS}}$ y ρ_T en función de la distancia al centro del núcleo. Se han señalado las áreas donde los estados $2d_{5/2}$, $1g_{7/2}$ y $3s_{1/2}$ son los principales estados que contribuyen.

Al igual que ocurre para el núcleo estudiado anteriormente, evidencia como esos estados indicados son los más influyentes en cuanto a la ligadura del sistema. De igual manera podemos concluir en que en particular, el sistema gana ligadura cuando el estado $2d_{5/2}$ cede casi la mitad de las cuasi-partículas que alojaba a los otros dos estados menos ligados, el $1g_{7/2}$ y el $3s_{1/2}$, pero no de la misma manera, sino que existe una preferencia a ceder al estado $1g_{7/2}$.

Esta circunstancia facilita que podamos avanzar en el conocimiento de por qué se da esta jerarquía de intercambio de cuasi-partículas. Sabemos que el objetivo de estos movimientos es el de aumentar la ligadura total del sistema. Por ello intentamos observar mediante un bloqueo de niveles, en el cual ya no se consideran ciertos estados de la ventana aunque participen en el cálculo de la estructura nuclear, que cantidad de cuasi-partículas cede a los otros dos restantes por separado, bloqueando primero uno y luego el otro, con el objetivo de estudiar cuales son las pautas del intercambio en comparación a lo que ocurre en el sistema sin bloquear y cuyos resultados se mostraron en la tabla 2.

Estados de	Capacidad	Partículas	Partículas	Partículas	Partículas
neutrones	cada estado	sin BCS	con BCS	con BCS	con BCS sin
que	(2j + 1)		Bloqueo	Bloqueo	bloqueo
participan			$3s_{1/2}$	$1g_{7/2}$	
$2d_{5/2}$	6	2	1.3146	1.8736	1.1786
$1g_{7/2}$	8	0	0.6854	0	0.6730
$3s_{1/2}$	2	0	0	0.1264	0.1484
Energía		-	-4.3875	-4.0926	-4.5079
Fermi					

La tabla 3 muestra los resultados del bloqueo.

Tabla 3: Reparto del número de cuasi-partículas en las distintas configuraciones del bloqueo de niveles y energía de Fermi resultante para cada caso. También se muestra el número de partículas (2j + 1) que puede acoger cada estado. Los niveles más ligados de la ventana de neutrones, $1f_{5/2}$, $2p_{1/2}$ y $1g_{9/2}$, fueron bloqueados ya que prácticamente no ceden cuasipartículas dada su distancia al nivel de Fermi, es por ello que no se muestran en esta tabla.

Las probabilidades de ocupación de los estados tienen como variables principales los valores del gap y de la energía de Fermi, que para cada cálculo con bloqueo de estados tiene el mismo valor, y las energías de los estados, las cuales son muy próximas en los tres estados que participan. Por lo tanto las probabilidades de ocupaciones de los tres estados serán muy similares. Todo ello parece indicar que la capacidad que tiene cada estado de alojar cuasi-partículas, dado por (2j+1), nos da la relación de las cuasipartículas que obtiene sobre el total de las disponibles. Así, vemos que la relación entre las capacidades de ocupación de los estados $1g_{7/2}$ y $3s_{1/2}$ es el resultado del cociente entre ambas, en este caso 8: 4 = 2. Así, el número de cuasipartículas que reciben sin bloqueo alguno se mantiene prácticamente en esa proporción, siendo respectivamente de 0.6730 y 0.1484, y su cociente 4.53, el cual es ligeramente superior, debido a que podría ser susceptible a las pequeñas diferencias de energías entre ambos niveles.

Los resultados de la tabla 3 también nos dicen en que grado existe una influencia entre los estados implicados en las CP. El bloqueo alternativo de cada nivel muestra que la participación de un estado sobre otro es muy pequeña, siendo el reparto de cuasipartículas para los tres estados muy similar al cálculo sin bloqueo.

5.5 Estudio extendido a dos cadenas de isótopos

Como ya vimos en la segunda sección, la implementación de las ecuaciones BCS en el modelo NL3 se realizó para protones y neutrones por separado. Aquí nos ocuparemos de ver las influencias de las CP de un tipo de nucleón sobre el otro. Entre las varias cadenas estudiadas se seleccionaron dos, una del Te y otra del Kr, las cuales recorren desde ¹²⁴Te hasta ¹³⁸Te y desde el ⁸⁰Kr hasta el ⁸⁸Kr respectivamente. El método que utilizaremos será representar la variación de los gaps, $\Delta_{n,p}$, en función del número másico A, cuando se habilitan las CP para un tipo de partícula y compararlo cuando están activas ambas. Como se desprende de la expresión (23), ésta sólo toma valores no nulos para estados que se encuentran próximos al nivel de Fermi; es decir, aquellos que pertenecen a la ventana, donde las probabilidades $|U_v|^2$ y $|V_v|^2$ son distintas de 0 y 1. Por el contrario, los estados fuera de la ventana, y por tanto más profundos que el nivel de Fermi, contribuirán con un valor nulo al ser $|U_v|^2 = 0$ y $|V|^2 = 1$, por lo que su producto se anula.

En la figura 15 se muestra como se produce la variación de Δ_p cuando se realiza el cálculo con las CP de protones activado y luego con las de ambas partículas a lo largo de la cadena del Te y del Kr.



Figura 15: Representación de Δ_p con BCS de protones activo (en rojo) y con el BCS de protones y neutrones (en azul) a lo largo de la cadena del Te (izquierda) y del Kr (derecha).

En la figura correspondiente a la cadena del Te se aprecia como ha variado el valor del gap Δ_p a lo largo de la cadena, evidenciando la influencia de las CP de neutrones sobre las de protones. Al ir avanzando en la cadena sobre el estado $1h_{11/2}$, las CP de neutrones sobre protones se van atenuando, hasta llegar al¹³²Te, último núcleo antes de cerrar capa, donde los estados de la ventana no varían mucho en su densidad, mientras que sí lo hacen los estados de fuera de la ventana, sobre todo los más internos, en particular los estados "s", atribuible a la ausencia de barrera centrífuga. Este hecho lo sabemos por nuestro análisis gráfico de la variación de sus densidades, puesto que esta información no la contiene la figura 15. Por otra parte, los estados de neutrones permanecen prácticamente inalterados. Al cerrar capa el pairing de neutrones no actúa, y apenas se producen cambios en todo el sistema con las CP habilitadas o sin ellas. Al pasar al siguiente núcleo,¹³⁶Te, vuelve a apreciarse la influencia de las CP de neutrones sobre protones, ya que se abre una nueva capa. La cadena del Kr presenta un comportamiento en gran medida opuesto a la del Te, en este caso no se ha produce una variación en el valor del gap de protones Δ_p hasta llegar al ⁸⁸Kr, lo que no quiere decir que no haya influencia de CP de neutrones sobre las de protones; esta influencia se ha producido, casi en su totalidad, sobre estados fuera de la ventana de protones como se desprende de nuestro análisis gráfico y sobre todo en estados "s", los más internos. Una vez cerrada la capa y pasando al núcleo ⁸⁸Kr la situación cambia por completo, siendo ahora las correlaciones de neutrones las que afectan a la totalidad de estados de protones, mientras que las CP de protones apenas influyen sobre los estados de neutrones

No se han representado las gráficas de Δ_n en función del número másico A, aunque hay que insistir que dichas correlaciones se dieron y fueron si cabe mas acusadas que las CP de neutrones sobre protones. Esto indica que el papel que juegan los protones en la interacción de pairing es importante, aun siendo menor el número de ellos frente al de neutrones y además con una constante de interacción de pairing G_p menor que G_n . Si representásemos la función $\rho_{T_{BCS}} - \rho_T$ cuando se produce la solución trivial de neutrones, para el ⁸⁶Kr, veríamos que queda configurada en su totalidad por estados de protones. Las influencias de las CP de una partícula sobre otra parecen obedecer el hecho de que cuanto mayor es N - Z los neutrones dominan en las CP. Mientras que cuando esa cantidad se hace pequeña, son los protones lo que adquieren una gran importancia, sobre todo sobre los estados más internos fuera de la ventana de neutrones.

Con el fin de ver el efecto de las CP, a continuación comparamos la predicción teórica de nuestro modelo con los datos experimentales de energía de ligadura por partícula en función del número másico. Disponiendo del modelo NL3, una vez añadido el mecanismo de pairing con el uso de las ecuaciones BCS, todos los sistemas estudiados tienen como resultado una energía de ligadura por nucleón mayor que la calculada sin las CP. Se muestran en las figuras 16 y 17 los valores de tales energías para los casos donde que se describen en ambas cadenas.



Figuras 16 y 17: Representación de la energía por nucleón para los núcleos de las cadenas del Te (figura superior) y del Kr (figura inferior) en cada aplicación del pairing descrita y sus valores experimentales.

En todos los casos se observa no sólo la ganancia de energía de ligadura al introducir las CP, sino también una notable adecuación de la forma de la función teórica a los datos experimentales. Ambos hechos evidencian la mejoría que hemos logrado en el modelo NL3 al dotarlo de las CP.

6. Conclusiones

1.- Hemos resuelto las ecuaciones BCS de la superconductividad numéricamente; creando dos programas de cálculo, uno en Fortran, y otro en MatLab, verificando su convergencia y fiabilidad.

2.- Hemos introducido estas ecuaciones, para protones y neutrones, en un modelo nuclear relativista; logrando la convergencia simultánea de todo el cálculo.

3.- Estudiamos los efectos de las CP, mediante un análisis espacial aplicado tanto a los potenciales nucleares como a las funciones de onda de los estados. Este método se puede considerar equivalente a la aplicación de una teoría perturbativa estándar, prácticamente inabordable en nuestro caso. Nuestro procedimiento presenta la ventaja de obtener unos resultados fáciles de interpretar; de este modo, podemos saber cómo se ven afectadas tanto la superfície como el interior del núcleo.

4.- Destacamos el hecho paradójico de que, a pesar de que en el modelo NL3, tal como ocurre en los modelos nucleares relativistas, el potencial del mesón ρ es mucho más pequeño que el de los mesones σ y ω su influencia es tan grande en las CP como la de estos, debido al efecto de cancelación que surge entre el σ y el ω .

5.- Estudiamos la influencia de las CP de los neutrones sobre los protones y viceversa, basándonos en dos métodos de análisis complementarios; uno, en términos de la variación del gap con el número másico; y el otro, en la observación de los cambios producidos en las distribuciones espaciales de los estados exteriores a la ventana. Como resultado de este estudio, detectamos influencias apreciables tanto de neutrones sobre protones como a la inversa. De este estudio deducimos que al aumentar el número de neutrones sobre el de protones las CP de aquellos se hacen dominantes globalmente. Por otra parte, vemos la variación del gap de un tipo de nucleones debido al efecto del otro a lo largo de dos cadenas de isótopos; concluyendo que, la influencia de los protones sobre los neutrones también puede ser importante. De este resultado cabe esperar que una solución superconductora de un tipo de nucleones pudiera inhibir o provocar el mismo tipo de solución en el otro.

6.- Para obtener una idea intuitiva del funcionamiento de las CP bloqueamos, a voluntad, determinados estados; lo que induce el intercambio de cuasi-partículas entre otros elegidos. De este estudio se concluye que, los estados más próximos al nivel de Fermi juegan un papel esencial en el reparto de cuasi-partículas. Siendo así, que para dos estados con energías similares el índice de ocupación de cada uno dependerá sobre todo de su momento angular, es decir, de la capacidad de alojamiento que tengan sus niveles respectivos.

7.- Hemos aplicado el modelo nuclear, NL3, con las CP a dos cadenas de isótopos: Te y Kr, contrastando la predicción teórica con la experimental en lo que se refiere a la energía de ligadura por nucleón. En ambos casos se observa la mejoría que hemos logrado en el modelo al dotarlo de las CP.

8.- De todos estos resultados concluimos que las vías de continuación de este trabajo podrían ser las siguientes: a) Ampliar el conjunto de datos sobre la carta de núcleos, extendiéndole a otras cadenas de isótopos. b) Hacer este mismo estudio con otros modelos; en particular, en la aproximación Hartree-Fock, lo que permitiría ver el efecto del pión. c) Analizar la posibilidad de una transición BCS \rightarrow BEC (condensado de Bose-Einstein) en la piel de neutrones. d) Utilizar el modelo NL3 con deformaciones.

7. Bibliografía

1. V. Zelevinsky and A. Volya.2003, arXiv:nucl-th/0303010v1

2. **A.T. Kieft**.2012, Tesis. University of Amsterdam. Faculty of Science Institute for Theoretical Physics

3. J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer. 1957, Phys. Rev. 106, 162; 108 1175

4. K-H. Schmidt and B.Jurado, arXiv:nucl-th/1007.0741.v1, 2010

5. *Nuclear Physics: Science and Applications*. European Science Foundation. Long Range Plan. 2010

6. J. Margueron, H. Sagawa and K. Hagino. Phys. Rev. C 76:064316 (2007)

7. A. Boussy, J.F. Mathiot, Nguyen Van Giai and S. Marcos. 1987, Phys. Rev. C 36 :1,380

8. G.A. Lalaszissis, S. Karatzikos, R. Foisson, D. Pena Arteaga, A.V.Atanasjev and P. Ring. 2009, Physics Letters B 671 36-41

9. Bohr, A., Mottelson, B. R., and Pines, D. 1958, Phys. Rev., pág. 110:936.

10. Applying BCS-BEC Crossover Theory To High Temperature Superconductors and Ultracold. Qijin Chen, Jelena Stajic, and K. Levin. James Franck Institute and Department of Physics, University of Chicago, Chicago, Illinois : s.n., 2008.

11. Kopnin, N. B. Theory of Superconductivity. Aalto : s.n., 2010.

12. M. Matsuo (Niigata U.), Y. Serizawa (Niigata U.), K. Mizuyama (Jyvaskyla). *Di-neutron correlations and pair transfers (paper in preparation)*. Niigata : s.n., 2007.

13. **D. M. Brink, R. A. Brolglia.** *Nuclear superfluidity*. Cambridge : Cambridge University Press, 2005. ISBN-13.

14. *Nuclear pairing models*. **P. Möller, J.R. Nix.** A536, Los Álamos : s.n., 1992, Nuclear physics.

15. On the effective pairing interaction strength in nuclei. **K. Böning, A. Sobiczewski.** 4, Varsaw : s.n., 1985, Acta Physica Polonica, Vol. B16.

16. A. G. Sitenki, V. K. Tartakovskii. *Lectures on the theory of the nucleus*. Oxford : Pergamon Press Ltd., 1975. ISBN 0-08-017876-6.

17. **R.J. Furnsthal and B.D. Serot**, *Quantum Hadrodynamics: Evolution and Revolution* arXiv:nucl-th/00572v2, 2000

18. **R. Niembro, P.Bernardos, M.L. Quelle and S. Marcos.**2001, J.Phys. G: Nucl.Part.Phys. A **27** 147-162

19. **B.D. Serot and J.D. Walecka**, *Recent Progress in Quantum Hadrodynamics*. arXiv:nucl-th/970105, 1997

20. **A. De Meucci.** Talk given on November 13, 2000, *Relativistic mean field theory of nuclear structure*. Dipartamento di Física Nucleare e Teorica Universita di Pavia.

21. **P.G. Reinhardt**.1989, *The relativistic mean-field description of nuclei and nuclear dynamics*. Rep.Prog.Phys. 52 439-514

22. Calculation of neutron equilibrium pairing in spherical single closed shell nuclei.
E. B. Balbutsev, Z. Bochnacki. 2, Varsaw : s.n., 1971, Acta Physica Polonica, Vol. B
3, pág. 288.

23. **D. M. Brink, R. A. Broglia.** *Nuclear Superfluidity*. Cambridge : Cambridge University Press, 2005. pág. 63. isbn-13.

24. *Iterative Methods for Linear*. **Kelley, C. T.** [ed.] North Carolina State University. Philadelphia : s.n., 1995, págs. 71-91.

25. *A Newton-Raphson method for the solution of system equations*. **Israel, Adi-Ben.** 2, August de 1966, Journal of mathematical analisis and applications, Vol. 15.

26. T-2 Nuclear Information Service. [En línea] Los Álamos National Laboratory, 1949. http://t2.lanl.gov/data/astro/molnix96/massd.html.