Revista Colombiana de Física,Vol. 41, No.2, Abril 2009

Niveles de una Partícula en un Potencial Nuclear Deformado utilizando teoría de perturbaciones

C. Mejía [a], J.Alexis Rodriguez [b]

[a]Departamento de Física,Universidad de los Andes, Bogotá, Colombia.
[b]Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Bogotá, Colombia.

Recibido 23 de Oct. 2007; Aceptado 6 de Mar. 2009; Publicado en línea 30 de Abr. 2009

Resumen

Consideramos el problema de una partícula en un potencial nuclear utilizando la aproximación de un potencial armónico más términos de interacción espín-orbita y de tipo L^2 tratados por teoría de perturbaciones, se calculan los orbitales permitidos de la partícula y las funciones de onda correspondientes. Se muestra como las perturbaciones remueven el degeneramiento en la energía pero deforman las funciones de onda, teniendo como máximo seis contribuciones de deformación. Con estas deformaciones las funciones de onda tienen una simetría cilíndrica dejando la simetría esférica del potencial nuclear sin deformar.

***Palabras Clave*:**Potencial Nuclear, Teoría de Perturbaciones, modelos nucleares.

Abstract

The problem of a particle in a deformed nuclear potential is considered using the approximation of a harmonic potential plus spin-orbit interaction and L^2 terms which are taken as perturbations. The allowed orbits are calculated, as well as their wave fuctions. It is shown how the perturbations deform the wave functions removing the energy degeneracy. These deformed wave functions are cylindrically symmetric with up to six contributions leading to the lost of the spherical symmetry of the undeformed nuclear potential.

***Keywords*:** Nuclear potential, perturbation theory, nuclear models.

1. Introducción

Para la discusión del Hamiltoniano de una partícula en un potencial nuclear deformado se toma la aproximación de un oscilador armónico con la adición de la interacción spin-orbita y un término proporcional a $\hat{L}^2$, con lo cual obtenemos una buena reprodución de los niveles de una partícula en un potencial nuclear, permitiendonos estudiar el caso del nucleo deformado. Una consecuencia de la adición del término $\hat{L}^2$ es la compresión de la distancia entre los cascarones (niveles) bajo $\hbar w_0$[1]. El espaciamiento de niveles es restaurado por la sustracción del termino $\langle \hat{L}^2 \rangle_N$ el cual asumimos como un valor constante para cada cascaron. Una forma de ver esto es que solo un termino proporcional a r^2 es convenientemente incluido en la condición de conservación del volumen, la variación radial debida a $\hat{L}^2$ puede ser contrarrestada sustrayendo el valor promedio de este. Si permitimos que el movimiento en el eje z sea diferente a los ejes x y y, entonces el Hamiltoniano toma la forma:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \frac{M}{2}\left[\omega_\perp^2(x^2+y^2)\right] + \frac{M\omega_z^2 z^2}{2} - C\hat{L}\cdot\hat{S} - D\left(\hat{L}^2 - \left\langle \hat{L}^2\right\rangle_N\right) \tag{1}$$

En donde $C = 2\kappa\hbar\omega_0$ y $D = \mu'\hbar\omega_0$ [2]. Este potencial se presta fácilmente para la generalización y aplicación del caso degenerado. Es conveniente introducir un parametro de elongación ϵ, tal que conserve el volumen nuclear [3], tal que $\omega_z = \omega_0(\varepsilon)\left(1 - \frac{2}{3}\varepsilon\right)$, $\omega_\perp = \omega_0(\varepsilon)\left(1 + \frac{1}{3}\varepsilon\right)$. Donde $\omega_0(\varepsilon)$ es debilmente dependiente, lo bastante para coservar el volumen nuclear. El valor de $\epsilon < 0$ ó $\epsilon > 0$ nos da la correspondiente forma oblata ó prolata del nucleo. Para valores grandes de ϵ podemos introducir una representación que diagonalice el oscilador, mientras que la parte de $\hat{L}^2$ y $\hat{L}\cdot\hat{S}$ los tratamos como perturbaciones.
Asi escribimos Ec.(1) como $H = H_{osc} + H'$, donde $H_{osc} = -\frac{\hbar}{2M}\Delta + \frac{M}{2}\left[\omega_\perp^2(x^2+y^2) + \omega_z^2 z^2\right]$. Tomando los cambios de variables: $\xi = x\left(\frac{M\omega_\perp}{\hbar}\right)^{1/2}$; $\eta = y\left(\frac{M\omega_\perp}{\hbar}\right)^{1/2}$; $\zeta = z\left(\frac{M\omega_z}{\hbar}\right)^{1/2}$, e introduciendo un $\hat{L}_t$ correspondiente a estas nuevas coordenadas $\left(\hat{L}_t\right)_x = -i\hbar\left(\eta\frac{\delta}{\delta\zeta} - \zeta\frac{\delta}{\delta\eta}\right)$, se tiene que $H' = -2\kappa\hbar\omega_0\hat{L}_t\cdot\hat{S} - \mu'\hbar\omega_0(\hat{L}_t^2 - \left\langle\hat{L}_t^2\right\rangle_N)$. Por la forma de la construcción la simetría es cilíndrica unicamente en la nueva base, luego se toman las coordenadas (ρ,φ,ζ) donde $\xi = \rho\sin\varphi$ y $\eta = \rho\cos\varphi$. Ahora podemos escribir la ecuación de Schrödinger en terminos de estas coordenadas y obtener una solución tipo oscilador con simetría cilíndrica

$$\begin{aligned} E\left(n_z, n_\perp\right) &= \hbar\omega_z\left(n_z + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega_\perp\left(n_\perp + 1\right) \\ &= \hbar\omega_0\left(N + \frac{3}{2} + (n_\perp - 2n_z)\frac{\varepsilon}{3}\right) \end{aligned} \tag{2}$$

$$\psi(n_z, n_\perp, m) = Ce^{-\zeta^2/2}H_{n_z}(\zeta)\rho^{|m|}e^{-\rho^2/2} F\left(\frac{|m| - n_\perp}{2}, |m|+1; \rho^2\right)e^{im\varphi} \tag{3}$$

La cantidad n_p es el número de nodos radiales, mientras que $n_\perp$ es el número total de oscilación en el eje x y y, tal que

$$2n_p + |m| = n_\perp \tag{4}$$

y $n_\perp = n_x + n_y$. Con lo cual $|m| = n_\perp; n_\perp - 2; n_\perp - 4$.....,0 ó 1. En este caso podemos anotar que para cada N cascaron, ($N = n_\perp + n_z$) este se divide en $N+1$ niveles correspondientes a $n_\perp = 0, 1, ...N$. El degeneramiento de cada nivel es $2(n_\perp + 1)$ debido a los dos valor de spin y los $n_\perp + 1$ diferentes valores de m para cada $n_\perp$ que vienen de Ec.(4).
Podemos anotar que aunque el nivel de estructura esférica se pierde cuando $\epsilon \neq 0$ un nuevo nivel reaparece. Así para ϵ=0.6 nosotros tenemos $\hbar\omega_\perp = 2\hbar\omega_z$, con lo cual podemos cambiar una cantidad $\hbar\omega_\perp$ por dos $\hbar\omega_z$ sin cambio de energía, tal como por una simetría esférica que intercambia $\hbar\omega_x$,$\hbar\omega_y$ y $\hbar\omega_z$.
El resto del Hamiltoniano lo podemos tratar como una perturbación de primer orden, luego solo necesitamos los términos diagonales: $\langle Nn_zms|\,\hat{L}_t\cdot\hat{S}\,|Nn_zms\rangle = m\,s$. En donde m y s son las proyecciones del momento angular orbital y de spin. Analogamente $\langle Nn_zms|\,\hat{L}_t^2\,|Nn_zms\rangle = m^2 + 2n_\perp n_z + 2n_z + n_\perp$. Finalmente la energía total del sistema perturbado será:

$$\langle Nn_zms|\,H\,|Nn_zms\rangle = \hbar\omega_0\left(N + \frac{3}{2} + (N - 3n_z)\frac{\varepsilon}{3}\right) - 2\kappa\hbar\omega_0 m\,s - \mu'\hbar\omega_0\gamma \tag{5}$$

Donde $\gamma = m^2 + 2n_\perp n_z + 2n_z + n_\perp - \frac{N(N+3)}{2}$, el efecto de la inclusión de el termino $\hat{L}_t\cdot\hat{S}$ y $\hat{L}_t^2$ en aproximación de perturbaciones es un levantamiento de la degeneración $2(n_\perp + 1)$, pero aun permanece dos veces degenerada debido a que todavía existe una simetría entre los ejes x y y.

Para desarrollar una solución por el método de operadores es preciso introducir los operadores de creación y destrucción similar a los que se trabajan en el oscilador armonico unidimensional, pero en el sistema (ξ,η,ζ), por ejemplo: $a_x = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \frac{\delta}{\delta\xi}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi + \frac{i}{\hbar}p_\xi)$ $a_x^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{\delta}{\delta\xi}) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\xi - \frac{i}{\hbar}p_\xi)$. Estos operadore tienen la propiedad de crear los estados propios del oscilador apartir del estado base. Ahora definamos los operadores: $R = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x - ia_y)$ y $\Sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}(a_x + ia_y)$. Por las reglas de conmutación entre los a_i se puede ver que R conmuta con $R^\dagger$ y análogamente para Σ. Luego se tiene que los operadores $R^\dagger$ y $\Sigma^\dagger$ incrementan mientras que R y Σ disminuyen en una unidad $n_\perp$. Como antes se supone una solución de la forma $\psi = Z(\zeta)U(\rho)\phi(\varphi) = |n_z\rangle\,|n_\perp, m\rangle$, la cual diagonaliza al Hamiltoniano H_{osc}. Al utilizar los operadores, estos estados se pueden escribir como $\psi = |n_z, r, \Sigma\rangle = \frac{1}{(n_z!r!\Sigma!)^{1/2}}\left(a_z^\dagger\right)^{n_z}\left(R^\dagger\right)^r\left(\Sigma^\dagger\right)^\Sigma|0\rangle$. Finalmente

$$H_{osc}\,|n_z, r, \Sigma\rangle = \left[\left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z + \left(n_\perp + 1\right)\hbar\omega_\perp\right]|n_z, r, \Sigma\rangle$$

Donde $n_\perp = r + \Sigma$. De igual manera definimos el operador $L_z = \frac{1}{i}\left(\xi\frac{\delta}{\delta\eta} - \eta\frac{\delta}{\delta\xi}\right) = \frac{1}{i}(a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_y) =$

$(R^\dagger R - \Sigma^\dagger\Sigma)$. Analogamente se pueden construir los operadores de subida y de bajada $L_+ = \sqrt{2}(a_z^\dagger\Sigma - a_z R^\dagger)$ y $L_- = \sqrt{2}(a_z\Sigma^\dagger - a_z^\dagger R)$. Con la utilización de estos operadores podemos comenzar con el estado $|n_z, n_\perp = r + \Sigma, m = r - \Sigma\rangle$ y construir otros estados $|n_z, n_\perp + 1, m + 1\rangle$. Si ahora incluimos el spin, el estado del sistema toma la forma $\psi = |n_z, r, \Sigma\rangle\,|S\rangle$. Con esto es posible evaluar los elementos matriciales de $L_t \cdot S$ y L_t^2. Tomando la expansión $L_t \cdot S = (L_t)_z S_z + \frac{1}{2}((L_t)_+ S_+ + (L_t)_- S_-)$, la energia del sistema perturvado será

$$\begin{aligned}\langle n_z, n_\perp, m, s|H\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle &= \langle H_{osc}\rangle - C\,\langle l\cdot s\rangle - D(\left\langle l^2\right\rangle - \left\langle l^2\right\rangle_N) \\ &= \left[\left(n_z + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_z + (n_\perp + 1)\,\hbar\omega_\perp\right] - \\ &\quad 2\kappa\hbar\omega_0 ms - \mu'\hbar\omega_0\gamma\end{aligned}$$

Con $\gamma = m^2 + 2n_\perp n_z + 2n_z + n_\perp - \frac{N(N+3)}{2}$.Tomando ω_z y $\omega_\perp$ en terminos de ω_0 y ϵ se tiene el mismo valor de energía que se encontró antes.

Ahora calculamos las funciones de onda usando teoría de perturbaciones a primer orden [4], donde usamos las autofunciones $|\psi_{n_z,n_\perp,m,s}\rangle$ dadas por Ec.(3) y la perturvación como $\widehat{V} = -C\hat{L}\cdot\hat{S} - D\left(\hat{L}^2 - \left\langle\hat{L}^2\right\rangle_N\right)$.

Para hallar los elementos matriciales de $\widehat{V}$ se debe tener en cuenta la ortonormalidad de los estados y el hecho que los operadores son diagonales en esta base. Con esto los únicos productos que sobreviven son

$$\begin{aligned}&\langle n_z - 1, n_\perp + 1, m + 1, s - 1|\,\hat{L}\cdot\hat{S}\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle \\ &= -\frac{1}{2}\left[n_z(n_\perp + m + 2)\right]^{1/2} \\ &\langle n_z + 1, n_\perp - 1, m + 1, s - 1|\,\hat{L}\cdot\hat{S}\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left[(n_z + 1)(n_\perp - m)\right]^{1/2} \\ &\langle n_z + 1, n_\perp - 1, m - 1, s + 1|\,\hat{L}\cdot\hat{S}\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle \\ &= -\frac{1}{2}\left[(n_z + 1)(n_\perp + m)\right]^{1/2} \\ &\langle n_z - 1, n_\perp + 1, m - 1, s + 1|\,\hat{L}\cdot\hat{S}\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle \\ &= \frac{1}{2}\left[n_z(n_\perp - m + 2)\right]^{1/2} \\ &\langle n_z + 2, n_\perp - 2, m, s|\,\hat{L}^2\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle \\ &= -\left[(n_z + 2)(n_z + 1)(n_\perp + m)(n_\perp - m)\right]^{1/2} \\ &\langle n_z - 2, n_\perp + 2, m, s|\,\hat{L}^2\,|n_z, n_\perp, m, s\rangle \\ &= -\left[(n_z - 1)n_z(n_\perp + m + 2)(n_\perp - m + 2)\right]^{1/2}\end{aligned}$$

Notamos que cada estado tiene a lo más seis correcciones debidas a la perturbación, y estas hacen que la simetría esférica se rompa. Para hallar explícitamente las correcciones se toman las diferencias de energías, las cuales son respectivamente : $\hbar(\omega_z - \omega_\perp)$,$\hbar(\omega_\perp - \omega_z)$,$\hbar(\omega_\perp - \omega_z)$,$\hbar(\omega_z - \omega_\perp)$,$2\hbar(\omega_\perp - \omega_z)$ y $2\hbar(\omega_z - \omega_\perp)$.

Finalmente el estado perturbado será

$$\begin{aligned}&|\varphi_{n_z,n_\perp,m,s}\rangle = |\psi_{n_z,n_\perp,m,s}\rangle \qquad (6)\\ &+ \frac{-\frac{1}{2}\left[n_z(n_\perp + m + 2)\right]^{1/2}}{\hbar(\omega_z - \omega_\perp)}\,|\psi_{n_z-1,n_\perp+1,m+1,s-1}\rangle \\ &+ \frac{\frac{1}{2}\left[(n_z + 1)(n_\perp - m)\right]^{1/2}}{\hbar(\omega_\perp - \omega_z)}\,|\psi_{n_z+1,n_\perp-1,m+1,s-1}\rangle \\ &+ \frac{-\frac{1}{2}\left[(n_z + 1)(n_\perp + m)\right]^{1/2}}{\hbar(\omega_\perp - \omega_z)}\,|\psi_{n_z+1,n_\perp-1,m-1,s+1}\rangle \\ &+ \frac{\frac{1}{2}\left[n_z(n_\perp - m + 2)\right]^{1/2}}{\hbar(\omega_z - \omega_\perp)}\,|\psi_{n_z-1,n_\perp+1,m-1,s+1}\rangle \\ &+ \frac{-\left[(n_z + 2)(n_z + 1)(n_\perp + m)(n_\perp - m)\right]^{1/2}}{2\hbar(\omega_\perp - \omega_z)} \\ &|\psi_{n_z+2,n_\perp-2,m,s}\rangle \\ &+ \frac{-\left[(n_z - 1)n_z(n_\perp + m + 2)(n_\perp - m + 2)\right]^{1/2}}{2\hbar(\omega_z - \omega_\perp)} \\ &|\psi_{n_z-2,n_\perp+2,m,s}\rangle\end{aligned}$$

Conclusiones

El efecto de la inclusión de el termino $\hat{L}_t\cdot\hat{S}$ y $\hat{L}_t^2$ en aproximación de perturbaciones es un levantamiento de la degeneración $2(n_\perp + 1)$, pero aun permanece dos veces degenerada debido a que todavía existe una simetría entre los ejes x y y. El resultado de la deformación del campo es entendible cualitativamente, por ejemplo, para la deformación prolata $(\epsilon > 0)$ la materia es removida hacia los polos, esto corresponde a un potencial suave en el eje z y a uno alto en el eje x y y donde las orbitas ecuatoriales son principalmente localizadas. Clásicamente es entendible que si los vectores de momentos angulares son casi paralelos al eje z y la partícula se mueve perpendicular a este eje, entonces la energía aumenta. Por otro lado para los orbitales con $j_z << j$ son asociados con una contribución negativa a la energia para $(\epsilon > 0)$. Para los oblatos el caso opuesto es totalmente valido. La perturvación remueve el degeneramiento pero deforma las funciones de onda, teniendo maximo seis contribuciones de deformación. Con estas deformaciones las funciones de onda tienen una simetría cilíndrica dejando la simetria esférica.

Referencias

[1] Mizushima,Masataka,*Quantum Mechanics of Atomic and Atomic Structure*,W.A.Benjamin,Inc,(1970).

[2] Nilsson,Sven y Ragnarson, ingermar,*Shape and Shell in Nuclear Structure*,CAMBRIGE UNIVERSITY PRESS,1995.

[3] Nilsson, S. G. 1955, Mat. -Fys. Medd. K Dan. Vidensk. Selsk. **29**, 16

[4] Shiff,L.I,*Quantum Mechanics*,Mc Graw-Hill,Inc,(1968).

[5] Dennery,Philippe y Krzywicki,André,*Mathematics for Physicists*,Harper & Row,Ltd,(1967).