



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

INSTITUTO DE FÍSICA

Estudo semiclássico de efeitos do contínuo em reações de transferência

Edna Carolina Pinilla Beltrán

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Orientador: Luiz Felipe Alvahydo de Ulhôa Canto

Co-orientador: Raul José Donangelo

Rio de Janeiro

Dezembro de 2007.

Livros Grátis

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

Estudo semiclássico de efeitos do contínuo em reações de transferência

Edna Carolina Pinilla Beltrán

Orientador: Luiz Felipe Alvahydo de Ulhôa Canto

Co-orientador: Raul José Donangelo

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Física, Instituto de Física, Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

Aprovada por:

Prof. Luiz Felipe Alvahydo de Ulhôa Canto
(Presidente e orientador)

Prof. Raul José Donangelo
(Co-orientador)

Prof. Sergio José Barbosa Duarte

Prof. Leandro Salazar de Paula

Rio de Janeiro

Dezembro de 2007.

B453 Pinilla Beltrán, Edna Carolina

Estudo semiclássico dos efeitos do contínuo em reações de transferência/ Edna Carolina Pinilla Beltrán - Rio de Janeiro, UFRJ / IF, 2007

xi, 83f.: il.;31cm.

Orientador: Prof. Luiz Felipe Alvahydo de Ulhôa Canto

Co-Orientador: Prof. Raúl José Donangelo

Dissertação (mestrado) - UFRJ / Instituto de Física / Programa de Pós-graduação em Física, 2007.

Referências Bibliográficas: f. 82-83.

1. Motivação do trabalho 2. Introdução teórica. 3. Nosso modelo semiclássico. 4. Conclusões e perspectivas. I. Luiz Felipe Alvahydo de Ulhôa. II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto de Física, Programa de Pós-graduação em Física. III. Estudo semiclássico dos efeitos do contínuo em reações de transferência.

Resumo

Estudo semiclássico de efeitos do contínuo em reações de transferência

Edna Carolina Pinilla Beltrán

Orientador *Luiz Felipe Alvahydo de Ulhôa Canto*

Co-orientador *Raúl José Donangelo*

Resumo da Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-graduação em Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

O desenvolvimento recente de aceleradores de núcleos instáveis abriu novas perspectivas em estudos de estrutura nuclear e de reações nucleares. Frequentemente, estes núcleos têm um ou mais nucleons de valência fracamente ligados e isto influencia fortemente as seções de choque para vários canais de reação. Diversos trabalhos teóricos e experimentais têm investigado o papel do acoplamento do canal elástico com canais no contínuo, especialmente em reações de fusão e de breakup. Efeitos importantes são também esperados na seção de choque de transferência de um nucleon. Um artigo recente estudou estes efeitos em um modelo semiclássico esquemático, comparando seções de choque a partir de um cálculo incluindo o contínuo e um cálculo em que ele não é levado em conta. Na presente tese, investigamos em maiores detalhes os efeitos do acoplamento, com o contínuo em reações de transferência. Utilizamos um modelo semiclássico análogo ao do artigo, mas por simplicidade, incluímos um único estado no contínuo com largura e energia média variáveis. Com isto conseguimos estudar as alterações nas probabilidades elástica e de transferência. Adicionalmente, achamos o potencial de polarização que está associado a perda ou ganho de fluxo do canal elástico acoplado ao canal de transferência e ao estado do contínuo.

Palavras-chaves: Reações de transferência, Modelo semiclássico, Estados do contínuo.

Rio de Janeiro

Dezembro de 2007

Abstract

Semiclassical study of continuum effects in transfer reactions

*Edna Carolina Pinilla Beltrn*Prof. *Luiz Felipe Alvahydo de Ulha Canto*

Resumo da Dissertação de Mestrado submetida ao Programa de Pós-graduação em Física, da Universidade Federal do Rio de Janeiro - UFRJ, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do título de Mestre em Ciências (Física).

The recent development of accelerators of unstable nuclei opened new perspectives in studies of nuclear structure and nuclear reactions. Often, these nuclei have one or more of valence nucleons weakly bound and this strongly influences the cross sections for several channels of reaction. Several theoretical and experimental studies have investigated the role of the elastic coupling of the channel with channels in the continuum, especially in fusion reactions and breakup. Important effects are also expected in the transfer cross section of a nucleon. A recent article studied these effects in a schematic semiclassical model, comparing cross sections from a calculation including the continuum and a calculation in which it isn't taken into account. In this thesis, we investigate in more detail the effects of coupling with the continuum in transfer reactions. We use a semiclassical model similar to that article but, for simplicity, we include a single state in the continuum with varying width and media energy. With this, we study the changes in the elastic and transfer probabilities. Additionally, we calculated the polarization potential associated with the loss or gain of flow of the elastic channel coupled to the transfer channel and the continuum state.

Key-words: Transfer reactions, Semiclassical model, Continuum states.

Rio de Janeiro

Dezembro de 2007

A minha família

Agradecimentos

Acredito que esta tem sido a parte mais difícil de escrever porque não quero me esquecer de todas as pessoas que me ajudaram durante a minha permanência em este país maravilhoso. Aquelas que me orientaram, brindaram sua amizade e ajuda, muito obrigada.

Quero agradecer especialmente a meu orientador Felipe Canto e ao meu co-orientador Raúl Donangelo pelo apoio oferecido desde o primeiro momento que eu cheguei ao Brasil. Obrigada pela dedicação e paciência com que me orientaram. De vocês aprendi muito.

A minha família pelo carinho e compreensão.

A Oscar pelo apoio, por acreditar sempre em me e pelas mil palavras de alento nos momentos difíceis.

A Kássila e Rúbens por me acolher na sua casa e fazer parte de minha família no Brasil.

A Cris, Kazu e Fernando pela ajuda e por fazer muito agradáveis as jornadas de estudo.

Agradeço a Germán, Mauricio, Nancy, Edana e Eduardo pela amizade e todo o apoio que me brindaram virtualmente.

A Carlos Bonilla, Carlos Molina, Angélica, Johanna e Mayra pelos gratos momentos.

Ao pessoal do IF, da pós e todos aqueles que contribuíram em fazer isto possível.

Ao CNPq pelo apoio econômico.

Mas, sobretudo agradeço a Deus por me permitir viver esta experiência.

Conteúdo

1	Introdução	1
2	Fundamentos teóricos de colisões nucleares	4
2.1	Colisões com um potencial	4
2.1.1	Colisões clássicas	4
2.1.2	Colisões quânticas	8
2.2	Reações Nucleares	11
2.2.1	As equações de canais acoplados	11
2.3	Potenciais de polarização	13
2.3.1	Aproximação semiclássica para o potencial de polarização	16
3	Descrição semiclássica de reações de transferência de um nêutron	20
3.1	O modelo de Marta <i>et al.</i>	20
3.1.1	Aproximação de dois níveis (sem efeitos do contínuo)	22
3.1.2	Solução na representação de coordenadas (com efeitos do contínuo)	24
3.2	Nosso modelo	26
3.2.1	Cálculos sem o contínuo	28
3.2.2	Efeitos do contínuo	34
3.2.3	Resultados para as probabilidades	38
3.2.4	Resultados para os potenciais de polarização	43
4	Conclusões e perspectivas	49
A	Equações diferenciais acopladas sem inclusão do contínuo	52
B	Equações diferenciais acopladas incluindo um estado no contínuo por paridade	56
B.1	Produtos internos	59
B.2	Elementos de matriz	64

C Exponencial integral e funções relacionadas	68
D Código computacional implementado	70

Lista de Figuras

1.1	Processos que serão levados em conta em uma reação do tipo $(Z, A + 1) + (A, Z) \rightarrow (Z, A) + (Z, A + 1)$: reação de transferência de um nêutron, difusão elástica e dissociação (<i>breakup</i>).	2
2.1	Espalhamento duma partícula com massa μ por um campo central.	6
3.1	Energias dos estados simétrico e anti-simétrico de um poço duplo, em função da separação entre os dois poços. Nesta ilustração, consideramos poços correspondentes a dois <i>cores</i> de ^{26}F com a profundidade adequada para ter um único estado ligado com energia $E_0 = -1.3$ MeV, separados por uma distância r	23
3.2	Sistemas de referência usados nos cálculos da Ref. [6] na representação de posição.	26
3.3	Esquema do potencial efetivo sentido pelo nêutron adotado em nosso modelo para a reação de transferência $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F} \rightarrow ^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$	27
3.4	Comparação das funções de ondas adiabáticas do presente trabalho (linhas cheias), $\varphi_b^{(\pm)}$, com as utilizadas na Ref. [6] (linhas tracejadas), $\phi_b^{(\pm)}$. As funções pares ($\varphi_b^{(+)}$ e $\phi_b^{(+)}$) são mostradas em (a) e (c) e as ímpares ($\varphi_b^{(-)}$ e $\phi_b^{(-)}$) em (b) e (d). Os resultados são apresentados para dois valores da distância entre os poços de potencial: $r = 150$ fm ((a) e (b)) e $r = 15$ fm ((c) e (d)).	30
3.5	Comparação entre a trajetória parabólica e a de Rutherford, calculadas no sistema centro de massa para $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$, com $E_{c.m.}$ igual a 8 MeV. No eixo- x , o tempo é expresso em unidades arbitrárias.	31
3.6	Pacotes de onda (a) $\varphi_c^{(+)}$ e (b) $\varphi_c^{(-)}$, utilizados na descrição do contínuo. Os parâmetros utilizados são $k_0 = 0.35$ fm $^{-1}$ e $\Delta_k = 0.01$ fm $^{-1}$	35
3.7	Os mesmos pacotes da figura anterior, com o mesmo k_0 , mas com a largura $\Delta_k = 0.1$ fm $^{-1}$	36

- 3.8 Comparação da probabilidade elástica como função de $E_{c.m.}$, quando os cálculos não apresentam estados no contínuo (curva cheia) com os cálculos que têm um estado no contínuo por paridade (curvas tracejadas com Δ_k) e com a solução no espaço de coordenadas (E. Coord.) segundo [6] no limite para potenciais tipo delta de Dirac. As curvas que envolvem estados no contínuo mostram como varia o comportamento mantendo fixo E_c para diferentes valores Δ_k . Para estas a energia de separação do nêutron $-B$ é igual a 1.3 MeV, assim como para o cálculo sem contínuo. Em todos os casos o sistema é $^{27}\text{F}+^{26}\text{F}$ numa colisão frontal, seguindo uma trajetória de Rutherford. 39
- 3.9 A mesma descrição da Figura 3.8 para os cálculos das probabilidades de transferência. 40
- 3.10 Descrição similar à da Figura 3.8 com as curvas que mostram os resultados para o modelo com um estado no contínuo mantendo fixa a largura do pacote de energia Δ_k e variando o valor da energia média do centro do pacote E_c . Para os cálculos com um estado no contínuo por paridade a distância máxima entre os centros dos poços $r_{\text{máx}}$ é igual a 2500 fm. 41
- 3.11 Descrição análoga à da Figura 3.10 para as probabilidades de transferência. . . . 41
- 3.12 Descrição idêntica à da Figura 3.8 com as curvas que envolvem estados no contínuo mostrando como varia o comportamento quando o vetor de onda k_0 associado ao centro do pacote é igual à largura Δ_k . Para os cálculos com um estado no contínuo por paridade a distância máxima entre os centros dos poços r_{max} é igual a 150 fm. 42
- 3.13 Descrição análoga à da Figura 3.12 para as probabilidades de transferência. . . . 43
- 3.14 Comparação da parte real do potencial de polarização como função da separação dos poços r quando os cálculos não apresentam estados no contínuo (curva cheia) com os cálculos que têm um estado no contínuo por paridade (curvas tracejadas). As curvas que envolvem estados no contínuo mostram como varia o comportamento mantendo fixo o valor da energia relacionada ao centro do pacote E_c para diferentes valores da largura do pacote Δ_k . Para estas a distância máxima entre os centros dos poços $r_{\text{máx}}$ é igual a 4000 fm para os gráficos (a) e (b) e 150 fm para os (c) e (d). A energia centro de massa $E_{c.m.}$ é de 16 MeV e energia de separação do nêutron $-B$ é igual a 1.3 MeV. Em todos os casos o sistema é $^{27}\text{F}+^{26}\text{F}$ numa colisão frontal seguindo uma trajetória Rutherford. 46
- 3.15 Descrição idêntica à Figura 3.14 para a parte imaginária do potencial de polarização. 47

Capítulo 1

Introdução

No estudo de reações nucleares com íons pesados [1, 2], os cálculos de seções de choque de transferência de uma partícula se restringem, em geral, a dois canais. O canal elástico, em que a partícula a ser transferida está ligada a um dos núcleos, e o canal de transferência, em que a partícula está ligada ao outro núcleo. Assim, estes tratamentos desprezam os efeitos do acoplamento com outros estados ligados e também com os estados do contínuo. Um exemplo clássico é a aproximação de ondas distorcidas, conhecida pela sigla DWBA (*Distorted Wave Born Approximation* [3]), em que o acoplamento de canais é tratado como uma perturbação de primeira ordem entre ondas distorcidas pelo potencial óptico. Aproximações desta natureza são inadequadas para colisões de núcleos fracamente ligados, em que a probabilidade de quebra (*breakup*) é relativamente grande. Nestes casos, o canal de *breakup* pode influenciar fortemente outros canais de reação. Esta influência é particularmente importante em colisões de núcleos nas vizinhanças das *drip lines*, onde o limiar de *breakup* pode chegar a frações de keV.

Existem diversos métodos para a inclusão de efeitos do contínuo em reações nucleares. O mais bem sucedido é a generalização do método de canais acoplados conhecida como *Continuum Discretized Coupled Channel method* (CDCC) [4, 5], em que o contínuo é truncado em uma energia E_{max} e o intervalo $[0, E_{max}]$ é aproximado por um conjunto discreto de N pacotes de onda. Assim, o problema é reduzido a um número finito de canais acoplados. O CDCC tem as vantagens de ser uma descrição completamente quântica e não perturbativa. Por outro lado, a discretização do contínuo é um processo complicado, que pode apresentar dificuldades numéricas. Assim, é conveniente o desenvolvimento de aproximações mais simples que levem em conta a influência do canal de *breakup* em outros canais de reação. Uma possibilidade interessante é o uso de aproximações semiclássicas.

Aproximações semiclássicas podem ser utilizadas quando o comprimento de onda associado ao

movimento relativo projétil-alvo, λ ,

$$\lambda = \frac{\hbar}{\sqrt{2\mu E_{c.m.}}}, \quad (1.1)$$

é bem menor que a distância característica do problema de colisão, D . Na equação acima, $E_{c.m.}$ é a energia de colisão no referencial centro de massa e $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ é a massa reduzida do sistema. Esta condição é frequentemente satisfeita em colisões de íons pesados. Para energias próximas da barreira Coulombiana,

$$E_{c.m.} \simeq V_B \simeq \frac{Z_1 Z_2 e^2}{R_B}, \quad (1.2)$$

podemos tomar como distância característica o raio da barreira. Isto é,

$$D \approx R_B \simeq R_1 + R_2 = 1.4 \left(A_1^{1/3} + A_2^{1/3} \right) \text{ fm}. \quad (1.3)$$

Nas equações acima, A_1 e A_2 são os números de massa do projétil e do alvo e Z_1 e Z_2 são seus números atômicos. No caso de reações de transferência de um nêutron entre núcleos leves formados por *cores* idênticos, isto é: $(Z, A+1) + (Z, A) \rightarrow (Z, A) + (Z, A+1)$, podemos aproximar $A_1 \simeq A_2 = A$ e $A \simeq 2Z$. A condição de validade da aproximação semiclássica pode então ser escrita

$$\frac{\lambda}{D} \simeq \frac{2.1}{Z^{5/3}} \ll 1. \quad (1.4)$$

Para $Z > 6$, $\lambda/D < 0.1$ e a aproximação semiclássica pode ser aplicada.

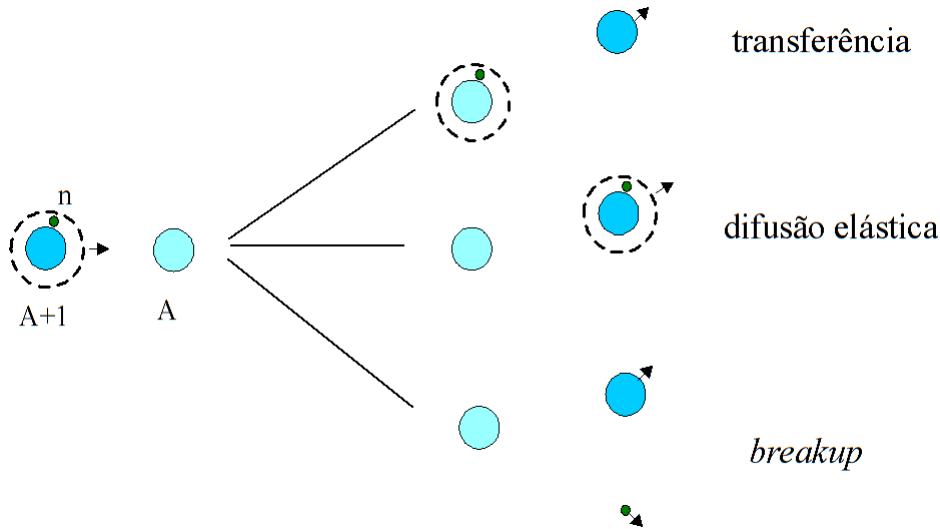


Figura 1.1: Processos que serão levados em conta em uma reação do tipo $(Z, A+1) + (A, Z) \rightarrow (Z, A) + (Z, A+1)$: reação de transferência de um nêutron, difusão elástica e dissociação (*breakup*).

Nesta tese, utilizamos uma aproximação semiclássica para estudar reações de transferência de

um nêutron entre núcleos formados por *cores* idênticos. Isto é, reações do tipo $(A+1, Z) + (A, Z) \rightarrow (A, Z) + (A+1, Z)$. Consideraremos, em particular, a reação $^{27}\text{F}(^{26}\text{F}, ^{27}\text{F})^{26}\text{F}$, que foi estudada em [6]. Para isto, representamos o núcleo ^{27}F como um *core* de ^{26}F mais um nêutron fracamente ligado. Descrevemos a colisão como o problema de uma partícula inicialmente ligada a um poço de potencial (o projétil) que interage com outro poço idêntico (o alvo). O movimento relativo projétil-alvo é descrito por uma trajetória clássica, enquanto a dinâmica do nêutron é tratada como um problema de mecânica quântica dependente do tempo. Supondo que as interações dos *cores* com o nêutron podem ser representadas por poços de potencial e que cada poço tem um único estado ligado, a colisão pode levar aos três tipos de situações representadas na Figura 1.1: dispersão elástica, transferência do nêutron ou dissociação do projétil (*breakup*).

Esta tese é organizada da seguinte forma: No capítulo 2 apresentamos uma breve revisão sobre tópicos de teoria de colisões que utilizamos de modo direto ou indireto nesta tese. No capítulo 3, discutimos o problema de transferência de um nêutron do ponto de vista semiclássico. Apresentamos os cálculos de Marta *et al.* [6] e introduzimos o modelo adotado no presente trabalho indicando algumas perspectivas do mesmo. Em seguida são mostrados os resultados de nossos cálculos. No capítulo 4 resumizamos os resultados do presente trabalho. Finalmente, alguns detalhes técnicos dos cálculos realizados são apresentados separadamente na forma de apêndices.

Capítulo 2

Fundamentos teóricos de colisões nucleares

Neste capítulo apresentamos uma revisão de alguns tópicos de teoria de colisões que são relevantes para o presente trabalho.

2.1 Colisões com um potencial

Inicialmente consideramos uma colisão entre dois núcleos em que seus graus de liberdades internos são ignorados. Embora o problema seja de natureza quântica, em diversas situações aproximações clássicas ou semiclássicas podem ser utilizadas. Assim, abordamos o problema dos pontos de vista das mecânicas clássica e quântica.

2.1.1 Colisões clássicas

Nesta seção discutimos a colisão de duas partículas carregadas do ponto de vista clássico [2, 7]. Começamos por lembrar que na colisão entre duas partículas pontuais podemos separar a translação do centro de massa do sistema do movimento relativo projétil-alvo. Isto é, se o projétil tem massa m_1 , carga Z_1e e momento linear \vec{p}_1 , e o alvo tem massa m_2 , carga Z_2e e momento linear \vec{p}_2 , podemos escrever o Hamiltoniano do sistema como

$$H = \frac{\vec{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\vec{p}_2^2}{2m_2} + V(\vec{r}_2 - \vec{r}_1). \quad (2.1)$$

Introduzindo as coordenadas relativa e do centro de massa,

$$\vec{r} = \vec{r}_2 - \vec{r}_1; \quad \vec{R}_{c.m.} = \frac{m_1 \vec{r}_1 + m_2 \vec{r}_2}{M}, \quad (2.2)$$

e seus momentos conjugados,

$$\vec{P}_{c.m.} = \vec{p}_1 + \vec{p}_2, \quad \vec{p} = \frac{\mu}{m_1} \vec{p}_1 - \frac{\mu}{m_2} \vec{p}_2, \quad (2.3)$$

podemos escrever o Hamiltoniano na forma

$$H = \frac{\vec{P}_{c.m.}^2}{2M} + \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(\vec{r}). \quad (2.4)$$

Nas equações acima, $M = m_1 + m_2$ é a massa total do sistema e $\mu = m_1 m_2 / (m_1 + m_2)$ é sua massa reduzida.

Como o centro de massa ou permanece em repouso, ou se movimenta com velocidade uniforme, nosso interesse se limita ao problema de uma partícula de massa μ em um campo central, ou seja

$$H_r = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} + V(r). \quad (2.5)$$

Tomando a velocidade \vec{v} incidente desta partícula paralela ao eixo z como representado na Figura 2.1, podemos escrever a equação anterior em coordenadas polares. Além disso, como a interação é central, a energia no referencial do centro de massa do sistema, $E_{c.m.}$, e o momento angular orbital, l , se conservam. Isto é, as quantidades

$$E_{c.m.} = \frac{1}{2} \mu \dot{r}^2 + \frac{l^2}{2\mu r^2} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}; \quad l = \mu r^2 \dot{\phi},$$

se mantêm constantes ao longo da colisão.

Se escrevemos a equação acima em termos do parâmetro de impacto $b = l/\mu v$, com $v = |\vec{v}|$, e definimos o potencial efetivo,

$$V_{ef} = \frac{1}{2} \mu v^2 \frac{b^2}{r^2} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, \quad (2.6)$$

vemos que

$$\dot{r} = \mp \sqrt{\frac{2}{\mu} (E_{c.m.} - V_{ef})}, \quad (2.7)$$

ou

$$\dot{r} = \mp v \sqrt{1 - \frac{b^2}{r^2} - \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r E_{c.m.}}}, \quad (2.8)$$

Onde o sinal (-) corresponde ao ramo incidente da trajetória e o sinal (+) ao emergente.

Das equações anteriores podemos calcular a distância de aproximação máxima, r_{ca} , impondo $\dot{r} = 0$. Desta forma obtemos

$$r_{ca} = a + \sqrt{a^2 + b^2}, \quad (2.9)$$

onde

$$a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_{c.m.}} \quad (2.10)$$

é a metade da distância de aproximação máxima para uma colisão frontal.

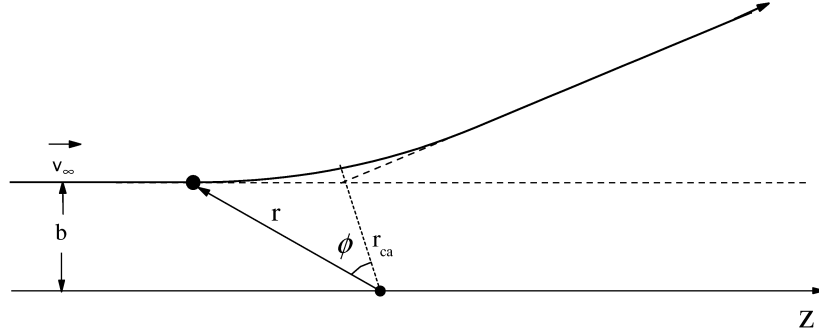


Figura 2.1: Espalhamento de uma partícula com massa μ por um campo central.

Se consideramos a equação (2.7) e as relações

$$\frac{d\phi}{dr} = \dot{\phi} \frac{dt}{dr} \quad \text{com} \quad \dot{\phi} = \frac{bv}{r^2}, \quad (2.11)$$

obtemos

$$\phi(r) = \mp bv \int_{r_{ca}}^r \frac{dr'}{r'^2 \sqrt{2(E_{c.m.} - V_{ef})/\mu}}, \quad (2.12)$$

ou

$$\phi(r) = \mp b \int_{r_{ca}}^r \frac{dr'}{r'^2 \sqrt{1 - \frac{b^2}{r'^2} - \frac{2a}{r'}}}. \quad (2.13)$$

É conveniente utilizar a parametrização [8]

$$r = a (\varepsilon \cosh w + 1), \quad (2.14)$$

onde w é um parâmetro sem dimensões que varia entre $-\infty$ e ∞ , sendo nulo em r_{ca} , e

$$\varepsilon = \sqrt{1 + \frac{l}{\hbar \eta}} \quad (2.15)$$

é a excentricidade da órbita hiperbólica. Na equação acima

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v_\infty}, \quad (2.16)$$

com v_∞ representando o valor assintótico da velocidade relativa, é o chamado parâmetro de Sommerfeld. A variável temporal pode também ser expressa em termos de w , na forma [8]

$$t = \frac{a}{v_\infty} (\varepsilon \sinh w + w). \quad (2.17)$$

Adotando a escala de tempo $t_0 = a/v_\infty$ e usando a variável adimensional $\tau = t/t_0$, a relação acima fica

$$\tau = \varepsilon \sinh w + w. \quad (2.18)$$

Substituindo a eq.(2.14) na eq.(2.13) obtemos

$$\phi = \sin^{-1} \left[\frac{\sqrt{\varepsilon^2 - 1} \sinh w}{\varepsilon \cosh w + 1} \right]. \quad (2.19)$$

No caso de uma colisão frontal, que é frequentemente considerado, $\varepsilon = 1$. Temos então

$$r = a (\cosh w + 1); \quad \tau = \sinh w + w \quad \text{e} \quad \phi = 0. \quad (2.20)$$

Em algumas situações em que interessa descrever apenas a região da trajetória nas vizinhanças do ponto de aproximação máxima, é suficiente considerar a aproximação quadrática

$$r \simeq r_{ca} + \frac{1}{2} \alpha t^2, \quad (2.21)$$

onde

$$\alpha = -\frac{1}{\mu} \left[\frac{\partial V_{ef}}{\partial r} \right]_{r_{ca}} \quad (2.22)$$

é a aceleração no ponto de aproximação máxima. Podemos também utilizar esta aproximação em termos da variável w ,

$$r \simeq r_{ca} + \frac{a\varepsilon}{2} w^2, \quad \tau \simeq (1 + \varepsilon) w, \quad (2.23)$$

e, portanto,

$$r \simeq r_{ca} + \frac{a\varepsilon}{2(1 + \varepsilon)^2} \tau^2. \quad (2.24)$$

Esta aproximação é usada por vários autores, como por exemplo Marta *et al.* [6], para des-

crever semiclássicamente reações de transferência em baixas energias, já que o processo ocorre nas vizinhanças do ponto de aproximação máxima. Um estudo quantitativo desta aproximação é feito nas seções 3.1.1 e 3.1.2, onde ela é usada para descrever semiclássicamente a reação de transferência $^{27}\text{F}(^{26}\text{F}, ^{26}\text{F})^{27}\text{F}$.

2.1.2 Colisões quânticas

Consideremos agora o problema de duas partículas quânticas sem estrutura interna e sem spin colidindo elasticamente. Em situações típicas, o problema pode ser aproximado pela difusão de uma onda por um potencial e a dinâmica é descrita pela versão quântica do Hamiltoniano da eq.(2.5). A difusão de uma onda incidente com vetor de onda \vec{k} , $\phi(\vec{k}, \vec{r})$, por um potencial $V(r)$ é representada pela função de onda $\psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r})$. Esta função satisfaz à equação

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] \psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}) = E \psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}), \quad (2.25)$$

com $E = \hbar^2 k^2 / 2\mu$, e, para potenciais de curto alcance, ela tem um comportamento assintótico ($|\vec{r}| \rightarrow \infty$) da forma

$$\psi^{(+)}(\vec{k}; \vec{r}) \rightarrow A \left[e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} + f(\hat{r}) \frac{e^{ikr}}{r} \right], \quad (2.26)$$

com $\hat{r} = \vec{r}/|\vec{r}|$. A seção de choque elástica é então calculada a partir do comportamento assintótico da função de onda. Ela é obtida a partir da amplitude de espalhamento, $f(\hat{r})$, na forma

$$\frac{d\sigma(\hat{r})}{d\Omega} = |f(\hat{r})|^2. \quad (2.27)$$

Se o potencial tem simetria esférica, é conveniente utilizar coordenadas esféricas $\{r, \theta, \varphi\}$. O Hamiltoniano toma a forma

$$H = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) - \frac{L^2}{\hbar^2 r^2} \right] + V(r), \quad (2.28)$$

onde L^2 é o operador correspondente ao módulo do momento angular ao quadrado,

$$L^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin^2 \theta} \left[\frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (2.29)$$

Precisamos então calcular a amplitude de espalhamento. O primeiro passo é expandir $\psi^{(+)}(\vec{k}; \vec{r})$ em ondas parciais,

$$\psi^{(+)}(\vec{k}, \vec{r}) = A \sum_{lm} C_{lm} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) \frac{u_l(k, r)}{kr}, \quad (2.30)$$

onde $Y_{lm}(\hat{r})$ são os Harmônicos esféricos usuais. Inserindo a expansão acima na eq.(2.25) e usando a ortonormalização dos Harmônicos esféricos, obtemos as equações radiais.

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] u_l(k, r) + V(r) u_l(k, r) = E u_l(k, r). \quad (2.31)$$

Em grandes distâncias, o potencial de curto alcance se anula e a equação radial se reduz a uma equação de partícula livre em coordenadas esféricas. Esta é a equação de Bessel-Ricatti. Podemos então expressar $u_l(k, r)$ como uma combinação linear de duas soluções independentes desta última. Para isto, usamos a solução com comportamento de onda incidente, $\hat{h}_l^{(-)}(kr)$, e a com comportamento de onda sainte, $\hat{h}_l^{(+)}(kr)$. Elas tem os comportamentos assintóticos [9]

$$\hat{h}_l^{(\pm)}(kr \rightarrow \infty) = \exp[\pm ikr],$$

com o qual podemos então escrever

$$u_l(k, r \rightarrow \infty) = \gamma_l \left[\hat{h}_l^{(-)}(kr) - e^{2i\delta_l} \hat{h}_l^{(+)}(kr) \right]. \quad (2.32)$$

Na equação acima, γ_l é uma constante de normalização e δ_l é um deslocamento de fase (*phase-shift*) da onda sainte devido à presença do potencial. Resolvendo-se numericamente as equações radiais para as quais $\delta_l \neq 0$, calculamos as defasagens e com elas obtemos a amplitude de espalhamento pela expansão em ondas parciais,

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum (2l+1) P_l(\cos \theta) (e^{2i\delta_l} - 1). \quad (2.33)$$

Na equação acima, θ é o ângulo entre a direção \hat{r} e o vetor de onda \vec{k} .

Frequentemente, as expressões acima são escritas em termos dos elementos da matriz-S que, no caso de colisões sem graus de liberdade internos, na representação de momento angular são

$$S_l = e^{2i\delta_l}. \quad (2.34)$$

Em colisões de partículas carregadas o potencial de interação é uma combinação de atração nuclear de curto alcance e repulsão coulombiana de longo alcance. Nestes casos a descrição quântica da colisão se complica bastante pois a condição assintótica nunca é atingida. Entretanto, a situação não é grave pois a difusão quântica por um potencial puramente Coulombiano tem solução analítica. Neste caso, podemos usar ondas incidentes e emergentes distorcidas pelo campo Coulombiano,

$\hat{H}_l^{(\pm)}(kr)$, para expressar as funções radiais fora do alcance da atração nuclear. A eq.(2.32) toma então a forma

$$u_l(k, r \rightarrow \infty) = \gamma_l \left[\hat{H}_l^{(-)}(kr) - e^{2i\bar{\delta}_l} \hat{H}_l^{(+)}(kr) \right], \quad (2.35)$$

onde a defasagem $\bar{\delta}_l$ representa a modificação das amplitudes coulombianas devido à interação de curto alcance. Descrições detalhadas do problema podem ser encontradas em textos de colisão quântica [9, 10]. A amplitude de espalhamento que dá a seção de choque é então a soma de dois termos,

$$f(\theta) = f_c(\theta) + \bar{f}(\theta). \quad (2.36)$$

A amplitude coulombiana é dada pela expressão analítica

$$f_c(\theta) = -\frac{\eta}{2k \sin^2(\theta/2)} e^{-i\eta \ln(\sin^2 \theta/2)} e^{2i\sigma_0} \quad (2.37)$$

e a correção devida ao potencial de curto alcance é dada pela expansão

$$\bar{f}(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum (2l+1) P_l(\cos \theta) e^{2i\sigma_l} \left(e^{2i\bar{\delta}_l} - 1 \right). \quad (2.38)$$

Nas equações acima, σ_l são as defasagens da difusão coulombiana dadas em [11].

2.2 Reações Nucleares

De um modo geral, os núcleos que participam em colisões nucleares possuem estruturas internas. Assim, a colisão pode levar a estados intrínsecos excitados. Neste caso, dizemos que ocorreu uma reação nuclear. Representando por ξ o conjunto de graus de liberdade intrínsecos e por \vec{r} as coordenadas relativas projétil-alvo, a dinâmica da colisão é gerada pelo Hamiltoniano

$$\mathbb{H} = H + h + \mathbb{V}. \quad (2.39)$$

Na equação acima,

$$H = T + U(r)$$

é a parte do Hamiltoniano que atua no espaço das coordenadas relativas, sendo T e U os operadores de energia cinética e potencial, h atua apenas no espaço das coordenadas intrínsecas e $\mathbb{V} \equiv \mathbb{V}(\vec{r}, \xi)$ a interação que acopla os graus de liberdades intrínsecos com os de colisão. O espaço intrínseco é descrito pelos estados que satisfazem à equação

$$h(\xi, p_\xi) \varphi_\alpha(\xi) = \varepsilon_\alpha \varphi_\alpha(\xi), \quad (2.40)$$

onde φ_α são as auto-funções de h e ε_α os autovalores correspondentes.

2.2.1 As equações de canais acoplados

A solução quântica para um problema de colisão nuclear em que os graus de liberdade internos são levados em conta é a função de onda $\Psi(\vec{r}, \xi)$, que satisfaz à equação

$$\mathbb{H} \Psi(\vec{r}, \xi) = E \Psi(\vec{r}, \xi), \quad (2.41)$$

onde E é a energia total do sistema. Para resolver a equação acima, expandimos a função de onda na base dos estados intrínsecos,

$$\Psi(\vec{r}, \xi) = \sum_{\beta=0}^{N-1} \psi_\beta(\vec{r}) \varphi_\beta(\xi). \quad (2.42)$$

Cada termo da expansão acima é chamado de um *canal de reação*. Para fins práticos, truncamos a expansão acima incluindo um número finito de canais N . Isto é, tomamos $\beta = 0, \dots, N - 1$. O canal elástico, que é sempre incluído na expansão, é rotulado com $\beta = 0$.

Substituímos então a expansão na eq.(2.41) e multiplicamos escalarmente por cada um dos

estados intrínsecos. Usando a ortonormalidade destes estados, obtemos o conjunto de equações de canais acoplados (CA)

$$\begin{aligned} [E - H] \psi_0(\vec{r}) &= \sum_{\beta=0}^{N-1} \mathbb{V}_{0,\beta}(\vec{r}) \psi_\beta(\vec{r}), \\ \dots\dots\dots & \dots\dots\dots \\ [E' - H] \psi_{N-1}(\vec{r}) &= \sum_{\beta=0}^{N-1} \mathbb{V}_{N-1,\beta}(\vec{r}) \psi_\beta(\vec{r}), \end{aligned} \quad (2.43)$$

onde $E' = E - \varepsilon_{N-1}$, $\varepsilon_0 = 0$ e

$$\mathbb{V}_{N-1,\beta}(\vec{r}) = \int d\xi \varphi_{N-1}^*(\xi) \mathbb{V}(\vec{r}, \xi) \varphi_\beta(\xi). \quad (2.44)$$

Estas equações têm que ser resolvidas com condições de contorno adequadas. Em distâncias assintóticas ψ_0 deve se comportar como uma superposição de uma onda incidente com uma onda emergente enquanto as demais funções de onda só devem ter componentes assintóticas emergentes. A partir destas funções de onda, podemos calcular seções de choque para cada um dos N canais envolvidos nas equações acima. Em uma reação nuclear há sempre um número infinito de canais acoplados. O procedimento adotado é representar os efeitos médios do acoplamento de canais por um potencial complexo, o potencial óptico [1, 12], e incluir explicitamente nas equações de CA apenas os canais que estão mais fortemente acoplados ao canal elástico.

Aproximação semiclássica para o problema de canais acoplados

Quando muitos canais são incluídos, a resolução das equações de CA requer cálculos numéricos bastante complexos. Para evitá-los foram desenvolvidos métodos aproximados. Um deles é a aproximação de trajetórias clássicas [8]. Neste caso, o movimento projétil-alvo é tratado como um problema de mecânica clássica. Assim, obtem-se uma trajetória $\vec{r}(t)$. Deste modo, o potencial de acoplamento passa a depender do tempo e dos graus de liberdades intrínsecos: $\mathbb{V}(\vec{r}, \xi) \rightarrow \mathbb{V}(\vec{r}(t), \xi) = \mathbb{V}(t, \xi)$. A dinâmica intrínseca é então tratada como um problema de mecânica quântica dependente do tempo. A função de onda intrínseca $\chi(\xi, t)$ é expandida na forma

$$\chi(\xi, t) = \sum_{\beta=0}^{N-1} a_\beta(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \varepsilon_\beta t} \varphi_\beta(\xi). \quad (2.45)$$

e a expansão é inserida na equação

$$[h + \mathbb{V}(t, \xi)] \chi(\xi, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(\xi, t). \quad (2.46)$$

Multiplicando escalarmente por cada um dos estados intrínsecos, obtemos um conjunto de N equações do tipo

$$i\hbar \frac{d}{dt} a_\alpha(t) = \sum_{\beta=0}^{N-1} e^{-\frac{i}{\hbar}(\varepsilon_\beta - \varepsilon_\alpha)t} V_{\alpha,\beta}(t) a_\beta(t), \quad \alpha, \beta = 0, N-1. \quad (2.47)$$

Estas equações são a versão semiclássica das equações de canais acoplados. Elas devem ser resolvidas com as condições iniciais $a_\alpha(t \rightarrow -\infty) = \delta_{\alpha,0}$ e seus valores assintóticos, $a_\alpha(t \rightarrow \infty)$, levam às seções de choque para os diferentes canais de reação.

2.3 Potenciais de polarização

O acoplamento de canais é responsável pelas reações nucleares mas ele modifica também a função de onda ψ_0 . Assim, a seção de choque elástica é também afetada. Em algumas situações estamos interessados apenas na seção de choque elástica. É conveniente então substituir o acoplamento de canais por um potencial adicional no canal elástico que leve a mesma função de onda ψ_0 obtida pela resolução das equações de canais acoplados. Este potencial é conhecido como potencial de polarização.

Para derivarmos expressões para o potencial de polarização, é conveniente formular o problema de canais acoplados usando o formalismo de Feshbach [13, 14]. O ponto de partida é a introdução dos operadores P e Q , que projetam a função de onda no canal elástico e no espaço complementar. Isto é

$$P = |\varphi_0\rangle \langle \varphi_0|; \quad Q = \sum_{\alpha \neq 0} |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|,$$

com o qual temos

$$P\Psi \equiv \Psi_P = \psi_0 \langle \varphi_0 | \Psi \rangle; \quad Q\Psi \equiv \Psi_Q = \sum_{\alpha \neq 0} \psi_\alpha \langle \varphi_\alpha | \Psi \rangle. \quad (2.48)$$

Acima o parêntesis arredondado indica projeção no espaço intrínseco. Estes projetores têm as propriedades¹

$$P^2 = P; \quad Q^2 = Q; \quad PQ = QP = 0 \quad \text{e} \quad P + Q \simeq 1. \quad (2.49)$$

Como a expansão em canais é truncada, a soma destes projetores não é exatamente igual ao operador identidade. Substituindo na eq.(2.41) $\Psi \rightarrow (P+Q)\Psi$, multiplicando a equação resultante por P e repetindo o procedimento com Q , e usando as propriedades dos projetores, obtemos as

¹Se houver truncamento do espaço de canais, como é feito em situações práticas, a relação $P + Q = 1$ é satisfeita de modo aproximado.

equações

$$(E - H_{PP}) \Psi_P = H_{PQ} \Psi_Q, \quad (2.50)$$

$$(E - H_{QQ}) \Psi_Q = H_{QP} \Psi_P. \quad (2.51)$$

Nas equações acima usamos as notações $H_{PP} = P\mathbb{H}P$, $H_{PQ} = P\mathbb{H}Q$, $H_{QP} = Q\mathbb{H}P$ e $H_{QQ} = Q\mathbb{H}Q$.

Multiplicando a eq.(2.51) pelo operador

$$G_{QQ}^{(+)} = (E - H_{QQ} + i\epsilon)^{-1},$$

obtemos

$$\Psi_Q = G_{QQ}^{(+)} H_{QP} \Psi_P.$$

Utilizando a equação acima na eq.(2.50), temos

$$\left(E - H_{PP} - H_{PQ} G_{QQ}^{(+)} H_{QP} \right) \Psi_P = 0. \quad (2.52)$$

Tomando o produto escalar da eq.(2.52) com o estado intrínseco φ_0 e lembrando que em nossa escala de energia $\varepsilon_0 = 0$, obtemos

$$(E - H^{opt} - V^{pol}) \psi_0 = 0, \quad (2.53)$$

com

$$H^{opt} = \langle \varphi_0 | H + \mathbb{V} | \varphi_0 \rangle,$$

$$V^{pol} = \langle \varphi_0 | H_{PQ} G_{QQ}^{(+)} H_{QP} | \varphi_0 \rangle.$$

Na expressão (2.53), o potencial de polarização V^{pol} contém os efeitos do acoplamento do canal elástico com os canais do espaço complementar.

Na representação de coordenadas, a eq.(2.53) pode ser escrita como

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2\mu} \nabla^2 + V^{opt}(r) \right] \psi_0(\vec{r}) + \int d^3 r' V^{pol}(\vec{r}, \vec{r}') \psi_0(\vec{r}') = E \psi_0(\vec{r}).$$

Com a introdução do potencial de polarização, a função de onda elástica passa a ser solução de um problema de colisão quântica com um potencial. Entretanto, devido a não localidade da função de Green $G_{QQ}^{(+)}$, o potencial de polarização é não local.

Para aplicações práticas, são efetuadas expansões em ondas parciais como na seção 2.1.2. A função de onda radial obedece então à equação

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \left[\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] + V^{opt}(r) \right\} u_l(r) + \int dr V_l^{pol}(r, r') u_l(r') = E u_l(r). \quad (2.54)$$

Em muitos casos de interesse é útil introduzir potenciais de polarização locais que sejam equivalentes aos definidos anteriormente. Ou seja, que produzam a mesma função de onda. Para isto, vamos definir o seguinte potencial de polarização local

$$U_l(r) = \frac{1}{u_l} \int dr' V_l^{pol}(r, r') u_l(r'). \quad (2.55)$$

O potencial local-equivalente da eq.(2.55) foi definido a partir da solução da eq.(2.54) com comportamento regular na origem. Em distâncias assintóticas, esta função radial é uma superposição de uma onda incidente com uma emergente. Entretanto, do ponto de vista formal, podemos definir também potenciais locais associados às soluções $u_l^{(-)}(r)$ e $u_l^{(+)}(r)$, que têm comportamentos assintóticos de uma onda puramente incidente e puramente emergente, respectivamente [15]. Eles são definidos como

$$U_l^{(\pm)}(r) = \frac{1}{u_l^{(\pm)}} \int dr' V_l^{pol}(r, r') u_l^{(\pm)}(r'). \quad (2.56)$$

Para relacionar o potencial U com os potenciais $U^{(\pm)}$, usamos a expressão [16]

$$u_l(r) = u_l^{(-)}(r) - u_l^{(+)}(r).$$

Após alguma álgebra, chegamos ao resultado

$$U_l(r) = \frac{1}{2} \left[(U_l^{(+)}(r) + U_l^{(-)}(r)) \right] + \frac{1}{2} \left[(U_l^{(+)}(r) - U_l^{(-)}(r)) \right] \frac{u_l^{(+)}(r) + u_l^{(-)}(r)}{u_l^{(+)}(r) - u_l^{(-)}(r)}. \quad (2.57)$$

Em energias abaixo da barreira Coulombiana podemos aproximar $u_l^{(\pm)}(r)$ por funções de Coulomb com as condições assintóticas correspondentes,

$$u_l^{(\pm)}(r) \simeq H_l^{(\pm)}(kr) = G_l(\eta, kr) \pm iF_l(\eta, kr).$$

Usando a aproximação acima na eq.(2.57), obtemos

$$U_l(r) = \frac{1}{2} \left[(U_l^{(+)}(r) + U_l^{(-)}(r)) \right] + \left[U_l^{(+)}(r) - U_l^{(-)}(r) \right] \frac{G_l(\eta, kr)}{2iF_l(\eta, kr)}. \quad (2.58)$$

Em colisões típicas de íons pesados, o número de onda é grande e as funções de Coulomb oscilam rapidamente. Assim, o segundo termo da expressão acima é rapidamente oscilante. Na medida em que a equação radial vai sendo integrada, seus efeitos sobre a função de onda vão se cancelando. Por este motivo, este termo pode ser desprezado e a equação acima toma a forma

$$U_l(r) \simeq \frac{1}{2} \left[U_l^{(+)}(r) + U_l^{(-)}(r) \right]. \quad (2.59)$$

Como veremos na próxima seção, a vantagem de escrever o potencial de polarização em termos de potenciais locais $U^{(\pm)}$ é que estes potenciais estão associados ao ramos entrantes e saíntes da trajetória clássica. Deste modo, podemos usar aproximações semiclássicas para obter o potencial $U(r)$.

2.3.1 Aproximação semiclássica para o potencial de polarização

Para chegarmos à aproximação semiclássica, consideramos inicialmente as funções de onda radiais obtidas com o potencial de polarização e sem ele. O Hamiltoniano do nosso problema contém o potencial efetivo total (dependente de l) $V_l = V_l^{opt} + U^{(\pm)}$. De acordo com a notação da seção anterior, quando a equação radial é resolvida com o potencial completo, a solução regular e as soluções incidente e emergente são representadas respectivamente por² u , $u^{(-)}$ e $u^{(+)}$. Por outro lado, podemos resolver a equação radial desprezando $U^{(\pm)}$. Isto é, considerando apenas o potencial óptico. Neste caso, representamos as soluções correspondentes por f , $f^{(-)}$ e $f^{(+)}$. A diferença entre estas funções resulta exclusivamente da ação do potencial de polarização. A razão

$$\alpha^{(\pm)}(r) = \frac{u^{(\pm)}(r)}{f^{(\pm)}(r)}, \quad (2.60)$$

indica a alteração sofrida pela função de onda elástica para cada valor da distância entre o projétil e o alvo.

Podemos obter uma expressão relacionando estas amplitudes com $U^{(\pm)}$ usando aproximações WKB para as funções de onda radiais incidentes e emergentes,

$$u^{(\pm)}(r) \simeq \frac{A}{\sqrt{K(r)}} \exp \left[\pm i \int dr' K(r') \right], \quad (2.61)$$

$$f^{(\pm)}(r) \simeq \frac{A}{\sqrt{k(r)}} \exp \left[\pm i \int dr' k(r') \right], \quad (2.62)$$

onde A é uma constante de normalização arbitrária e $K(r')$ e $k(r')$ são os números de onda com

²Para simplificar a notação, omitimos a partir daqui o sub-índice l das funções de onda radiais.

e sem o potencial de polarização

$$K^{(\pm)}(r') = \frac{\sqrt{2\mu [E - V_l^{opt}(r') - U^{(\pm)}(r')]}}{\hbar}, \quad (2.63)$$

$$k(r') = \frac{\sqrt{2\mu [E - V_l^{opt}(r')]}}{\hbar}. \quad (2.64)$$

Estes números de onda satisfazem à relação

$$K^{(\pm)}(r') = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2\mu [E - V_l^{opt}(r')]} \sqrt{1 - \frac{U^{(\pm)}(r')}{E - V_l^{opt}(r')}},$$

ou

$$K^{(\pm)}(r') = k(r') \sqrt{1 - \varepsilon^{(\pm)}}, \quad (2.65)$$

com

$$\varepsilon^{(\pm)} = \frac{U^{(\pm)}(r')}{E - V_l^{opt}(r')}. \quad (2.66)$$

Se assumimos que o potencial de polarização é uma pequena correção, $\varepsilon \ll 1$. Podemos então expandir $K(r')$ em série e considerar apenas a primeira ordem em ε . Deste modo, obtemos

$$K^{(\pm)}(r') \simeq k(r') - \frac{1}{\hbar v(r')} U^{(\pm)}(r'), \quad (2.67)$$

onde o valor absoluto da velocidade local é

$$v(r') = \frac{\hbar k(r')}{\mu}. \quad (2.68)$$

Usando a aproximação acima, podemos calcular as amplitudes $\alpha^{(\pm)}$. Substituindo a eq.(2.67) nas eqs.(2.61) e (2.62) e inserindo o resultado em (2.60), obtemos

$$\begin{aligned} \alpha^{(\pm)}(r) &= \sqrt{\frac{k(r)}{K(r)}} \exp \left[\pm i \int dr' (K(r') - k(r')) \right] \\ &\simeq \sqrt{\frac{k(r)}{K(r)}} \exp \left[\mp \frac{i}{\hbar} \int dr' \frac{U^{(\pm)}(r')}{v(r')} \right]. \end{aligned}$$

Desprezando a diferença entre os números de onda no fator $k(r)/K(r)$, chegamos ao resultado

$$\alpha^{(\pm)}(r) \simeq \exp \left[\mp \frac{i}{\hbar} \int dr' \frac{U^{(\pm)}(r')}{v(r')} \right]. \quad (2.69)$$

Podemos obter os potenciais de polarização em termos da equação acima. Tomando o logaritmo

natural em ambos os membros da igualdade e derivando em relação a r obtemos

$$U^{(\pm)}(r) = \pm i\hbar v(r) \frac{d}{dr} \left[\ln \alpha^{(\pm)}(r) \right]. \quad (2.70)$$

A idéia básica do método semiclássico da Ref. [15] é utilizar a trajetória clássica para relacionar a variável temporal com a distância radial e aproximar as amplitudes $\alpha^{(\pm)}$ por valores da amplitude semiclássica do canal elástico, dada pela eq.(2.47). Como o potencial de polarização representa os efeitos do acoplamento de canais sobre o canal elástico, as amplitudes $\alpha^{(\pm)}(r)$ estão relacionadas com $a_0(t)$. Há porém a dificuldade de que $\alpha^{(\pm)}(r)$ e $a_0(t)$ são funções de variáveis diferentes. Este problema pode ser resolvido através da trajetória clássica, $r(t)$, que determina a distância radial a cada instante. Precisariamos então de sua inversa, $t(r)$, para converter $a_0(t) \rightarrow a_0(r) = a_0(t(r))$. Entretanto, $r(t)$ não tem uma única inversa pois há dois instantes em que a distância assume um determinado valor: o instante $t^{(-)}$, no ramo entrante da trajetória, e um instante posterior, $t^{(+)}$, no ramo saínte. Deste modo, fazemos a associação

$$\alpha^{(\pm)}(r) = a^{(\pm)}(r) \equiv a_0(t^{(\pm)}(r)). \quad (2.71)$$

Usando a eq.(2.71) na eq.(2.70) obtemos

$$U^{(\pm)}(r) = \pm i\hbar v(r) \frac{d}{dr} \left[\ln a^{(\pm)}(r) \right]. \quad (2.72)$$

O potencial de polarização associado a solução regular pode ser então obtido substituindo a equação acima na eq.(2.59). Obtemos

$$U(r) = i\hbar \frac{v(r)}{2} \left(\frac{d}{dr} \left[\ln a^{(+)}(r) \right] - \frac{d}{dr} \left[\ln a^{(-)}(r) \right] \right). \quad (2.73)$$

Para escrever a relação (2.73) em termos da variável w que parametriza a trajetória hiperbólica, é conveniente lembrar as equações (2.14) e (2.17). Isto é

$$\begin{aligned} r(w) &= a (\varepsilon \cosh w + 1), \\ t(w) &= \frac{a}{v_\infty} (\varepsilon \sinh w + w), \end{aligned} \quad (2.74)$$

Assim, podemos escrever

$$v(w) = \left| \frac{dr}{dw} \frac{dw}{dt} \right| = \frac{v_\infty \varepsilon |\sinh w|}{\varepsilon \cosh w + 1}, \quad (2.75)$$

enquanto as derivadas logarítmicas são dadas por

$$\frac{d}{dr} \left[\ln a^{(\pm)}(r(w)) \right] = \pm \frac{1}{a \varepsilon |\sinh w|} \frac{d}{dw} \left[\ln a^{(\pm)}(r(w)) \right]. \quad (2.76)$$

Substituindo as equações (2.75) e (2.76) em (2.73), concluímos que o potencial de polarização em termos do parâmetro w é

$$U(w) = i\hbar \frac{v_\infty}{2r(w)} \left(\frac{d}{dw} \left[\ln a^{(+)}(w) \right] + \frac{d}{dw} \left[\ln a^{(-)}(w) \right] \right). \quad (2.77)$$

Estes resultados serão utilizados no próximo capítulo, onde usamos um modelo semiclássico para descrever o acoplamento do canal elástico com um canal de transfêrencia e com o contínuo. Neste caso, o potencial de polarização associando estes acoplamentos é obtido a partir das amplitudes elásticas $a_0^{(\pm)}$.

Capítulo 3

Descrição semiclássica de reações de transferência de um nêutron

Neste capítulo discutimos o tratamento semiclássico de reações de transferência de um nêutron desenvolvido por Marta *et al.* [6] e apresentamos nosso modelo semiclássico para o tratamento do mesmo problema.

3.1 O modelo de Marta *et al.*

Um modelo semiclássico em uma dimensão foi desenvolvido em [6], para descrever o problema da colisão de dois *cores* idênticos, B_1 (projétil) e B_2 (alvo), estando o nêutron inicialmente ligado a B_1 . Este estudo foi particularizado para a colisão $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$. O movimento relativo entre os *cores* segue uma trajetória clássica $r(t)$ e as interações dos *cores* com o nêutron são representadas por poços de potencial, cada um deles tendo um único estado ligado.

Para estudar a influência do contínuo, estes autores efetuam dois cálculos diferentes. No primeiro destes cálculos, a função de onda do nêutron é expandida nos dois auto-estados do Hamiltoniano de um poço de potencial duplo: o estado simétrico e o anti-simétrico. O estado inicial, com o nêutron ligado ao projétil, e os estados finais, com o nêutron ligado ao projétil (colisão elástica) ou ao alvo (reação de transferência), são combinações lineares dos estados simétricos e anti-simétrico do Hamiltoniano com o poço duplo. Os coeficientes das combinações lineares são obtidos das condições iniciais e da evolução temporal dada pela equação de Schrödinger dependente do tempo. A partir dos valores assintóticos destes coeficientes, são obtidas as probabilidades elástica e de transferência. Este cálculo elimina qualquer influência de estados do contínuo na colisão.

É efetuado em seguida um segundo cálculo em que o contínuo é levado em conta. A equação de Schrödinger dependente do tempo é resolvida numericamente na representação de coordenadas e as probabilidades elástica e de transferência são dadas pelas projeções do estado final nos orbitais ligados a cada um dos poços. Com o uso da representação de posição, todo o espectro do Hamiltoniano (estados ligados e no contínuo) é levado em conta. Através da comparação de resultados obtidos pelos dois métodos, o efeito global do acoplamento com o contínuo pode ser avaliado.

Nos cálculos de [6] o Hamiltoniano é dado por

$$H = T + V_{ef}, \quad (3.1)$$

onde

$$T = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (3.2)$$

é o operador de energia cinética e

$$V_{ef}(x, t) = V_1(x, t) + V_2(x, t) \quad (3.3)$$

é o potencial efetivo que atua sobre o nêutron. Na eq.(3.2), m_0 é a massa do nucleon. Na eq.(3.3), os potenciais V_1 e V_2 , que representam respectivamente as interações do nêutron com os *cores* B_1 e B_2 , são aproximados pelos poços quadrados

$$V_1(x, t) = \begin{cases} -V_0 & \text{para } -\frac{r(t)+d}{2} \leq x \leq -\frac{r(t)-d}{2}, \\ 0 & \text{em outro caso,} \end{cases}$$

$$V_2(x, t) = \begin{cases} -V_0 & \text{para } \frac{r(t)-d}{2} \leq x \leq \frac{r(t)+d}{2}, \\ 0 & \text{em outro caso.} \end{cases}$$

A largura do poço quadrado é $d = 2R$, onde $R = 1.2 A^{1/3}$ fm é o raio dos *cores*. Para o sistema estudado, $A = 26$. A profundidade do poço, V_0 , é determinada pela condição de que cada poço tenha um único estado ligado, com uma energia de ligação pre-estabelecida, B . A dependência temporal dos potenciais vem da trajetória clássica $r(t)$, que na Ref. [6] é aproximada por uma parábola. Esta parábola corresponde a uma expansão de segunda ordem em torno do ponto de aproximação máxima em uma colisão frontal.

Nas duas sub-seções seguintes discutiremos em maiores detalhes os dois cálculos da Ref. [6].

3.1.1 Aproximação de dois níveis (sem efeitos do contínuo)

Como o Hamiltoniano da eq.(3.1) é invariante por reflexão espacial, podemos construir soluções da equação de Schrödinger com paridade definida. Como ponto de partida para descrever a colisão, são consideradas as soluções estacionárias ligadas de H , quando se despreza o movimento relativo entre B_1 e B_2 (fixando o valor de r). Neste caso, é possível construir uma função simétrica $\phi_b^{(+)}(x)$ e outra anti-simétrica $\phi_b^{(-)}(x)$, com as propriedades

$$\begin{aligned}\phi_b^{(+)}(-x) &= \phi_b^{(+)}(x), \\ \phi_b^{(-)}(-x) &= -\phi_b^{(-)}(x).\end{aligned}\tag{3.4}$$

Estas funções, que são chamadas de adiabáticas, correspondem a auto-funções instantâneas da equação de Schrödinger, quando a variação temporal do Hamiltoniano é desprezada. Elas satisfazem às equações

$$\begin{aligned}H\phi_b^{(+)}(x) &= E_+\phi_b^{(+)}(x), \\ H\phi_b^{(-)}(x) &= E_-\phi_b^{(-)}(x),\end{aligned}\tag{3.5}$$

com $E_+ < E_- < 0$, sendo E_+ e E_- as auto-energias associadas aos estados par e ímpar, respectivamente. Elas são funções da separação entre os poços de potencial, embora isto não esteja sendo indicado explicitamente. Em distâncias assintóticas elas se degeneram e assumem o valor da energia de ligação no poço quadrado. Isto é: $E_+(r \rightarrow \infty) = E_-(r \rightarrow \infty) = E_0 = -B$. Na Figura 3.1 ilustramos o comportamento das energias E_+ e E_- em uma situação concreta. Consideramos núcleos com $A = 26$, tendo um único estado ligado com energia $E_0 = -1.3$ MeV.

A partir de $\phi_b^{(+)}(x, t)$ e $\phi_b^{(-)}(x, t)$ podem ser construídos os orbitais adiabáticos $\psi_1(x, t)$ e $\psi_2(x, t)$, que representam respectivamente o nêutron ligado a B_1 e a B_2 . Estes orbitais são dados por

$$\begin{aligned}\psi_1(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_b^{(+)}(x, t) - \phi_b^{(-)}(x, t)\right), \\ \psi_2(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_b^{(+)}(x, t) + \phi_b^{(-)}(x, t)\right).\end{aligned}\tag{3.6}$$

No tratamento de dois níveis de Marta *et al.*, a função de onda do nêutron em cada instante é escrita como a combinação linear

$$\Psi(x, t) = C_1\psi_1(x, t) + C_2\psi_2(x, t),\tag{3.7}$$

onde os coeficientes C_1 e C_2 são funções do tempo. Como antes da colisão o nêutron está ligado a B_1 , partimos dos valores iniciais: $C_1 = 1, C_2 = 0$. Ao longo da colisão, estes coeficientes assumem valores diferentes. Para obter suas evoluções temporais, a expansão acima é substituída na equação de Schrödinger dependente do tempo. Isto é

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t)] = H [C_1\psi_1(x,t) + C_2\psi_2(x,t)]. \quad (3.8)$$

Tomando produtos escalares de $\phi_b^{*(+)}(x,t)$ com cada membro da eq.(3.8) e em seguida repetindo a operação com $\phi_b^{*(-)}(x,t)$, foram obtidas as seguintes equações semiclássicas de canais acoplados,

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{C}_1(t) &= E'(t) C_1(t) + \Delta(t) C_2(t), \\ i\hbar\dot{C}_2(t) &= \Delta(t) C_1(t) + E'(t) C_2(t). \end{aligned} \quad (3.9)$$

Nas equações acima, foram adotadas as notações:

$$E'(t) = \frac{E_+ + E_-}{2}; \quad \Delta = \frac{E_+ - E_-}{2}. \quad (3.10)$$

Para obter estas equações foi levado em consideração que as funções $\phi_b^{(+)}$ e $\phi_b^{(-)}$ estão normalizadas e que os produtos internos que misturam paridades se anulam.

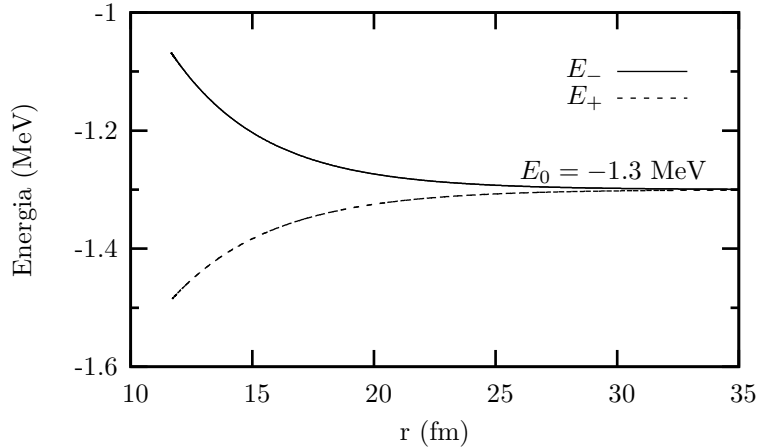


Figura 3.1: Energias dos estados simétrico e anti-simétrico de um poço duplo, em função da separação entre os dois poços. Nesta ilustração, consideramos poços correspondentes a dois *cores* de ^{26}F com a profundidade adequada para ter um único estado ligado com energia $E_0 = -1.3$ MeV, separados por uma distância r .

Probabilidades elástica e de transferência

As equações diferenciais dadas em (3.9) são resolvidas numericamente, a partir das condições iniciais: $C_1(t \rightarrow -\infty) = 1$ e $C_2(t \rightarrow -\infty) = 0$. Neste contexto, $t \rightarrow -\infty$ representa os estágios iniciais da colisão, em que a distância r é suficientemente grande para que o potencial do *core* B₂ não afete o estado do nêutron que se encontra ligado ao core B₁. Na medida em que o tempo evolui, os núcleos vão se aproximando até a distância de aproximação máxima r_{ca} . Na escala de tempo adotada, isto ocorre em $t = 0$. Em $t \approx 0$ a função de onda do nêutron é fortemente afetada pelos potenciais V_1 e V_2 . Depois disso, os núcleos se afastam até que em $t \rightarrow \infty$ a distância entre B₁ e B₂ volta a ser suficientemente grande para que a presença de um dos poços não afete o orbital ligado do outro.

As probabilidades elásticas, P_{el} , e de transferência do nêutron, P_{tr} , foram determinadas a partir das amplitudes assintóticas, pelas seguintes equações

$$P_{el} = |C_1(t \rightarrow \infty)|^2; \quad P_{tr} = |C_2(t \rightarrow \infty)|^2.$$

Estas probabilidades satisfazem à equação

$$P_{el} + P_{tr} = 1. \quad (3.11)$$

Isto se deve ao fato de que probabilidade de *breakup*, P_{bu} , é nula. Como estados no contínuo não são considerados, a função de onda do nêutron se restringe aos estado ligados ψ_1 e ψ_2 .

3.1.2 Solução na representação de coordenadas (com efeitos do contínuo)

Neste caso Marta *et al.* [6] analisam a colisão $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$ no referencial do projétil, onde o nêutron esta ligado antes da colisão. Os poços quadrados são generalizados para os potenciais de Woods-Saxon,

$$V_1(x) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{|x| - R}{a_r}\right]},$$

$$V_2(x, t) = -\frac{V_0}{1 + \exp\left[\frac{|x - r(t)| - R}{a_r}\right]},$$

onde a_r é o parâmetro de difusividade associado ao núcleo ^{26}F . Pode-se notar que no limite $a_r \rightarrow 0$ recuperam-se os poços quadrados da seção anterior.

No instante inicial, a função de onda do nêutron corresponde a um orbital centrado na origem

(referencial do projétil) e o alvo está a uma distância suficientemente grande para não influenciar o estado do nêutron. Efetua-se então a evolução temporal da função de onda na representação de coordenadas. Na medida em que o alvo vai se aproximando do projétil, seguindo a trajetória clássica $r(t)$, seu potencial vai distorcendo a função de onda do nêutron. Assim, ele atinge a aproximação máxima e em seguida começa a se afastar. Este procedimento é seguido até que a distância entre projétil e alvo volte a ser muito grande. Como a função de onda $\Psi(x, t)$ é sempre calculada na representação de coordenadas, ela inclui todas as componentes do espectro do Hamiltoniano adiabático, incluindo os estados no contínuo. Para a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo, foi utilizado o algoritmo de Crank-Nicholson [17].

Probabilidades elástica e de transferência

Para achar as probabilidades elástica e de transferência do nêutron, é necessário tomar produtos escalares da função de onda no final da colisão, $\Psi(x, t \rightarrow \infty)$, com os orbitais ligados ao projétil e ao alvo, respectivamente. Para isto, devem ser considerados os referenciais representados na Figura 3.2. O referencial F_1 tem sua origem no centro do *core* B_1 , ao qual o nêutron está ligado inicialmente, e se movimenta com ele durante a colisão. O referencial F_2 tem seu centro no alvo e se movimenta sempre com ele. Como estamos descrevendo a dinâmica do nêutron no referencial F_1 , a função de onda ligada ao alvo corresponde a um orbital se transladando com a velocidade assintótica $v_0 = \sqrt{2E_{c.m.}/\mu}$.

Denotemos por $\Psi_2(x, t)$ a função de onda do nêutron quando se encontra ligado ao *core* B_2 descrita no referencial F_1 e por $\Phi(x)$ esta mesma função para um observador no referencial F_2 . Estas funções de onda são relacionadas por uma translação de r e por uma transformação de Galileu [18], na forma

$$\Psi_2(x, t) = \Phi(x - r(t)) \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} \left[mv_0 x - \left(\epsilon + \frac{1}{2} mv_0^2 \right) t \right] \right\}, \quad (3.12)$$

sendo $\epsilon = -B < 0$ a energia do estado ligado em um dos poços quando $r \rightarrow \infty$. Nas equações acima m é a massa do nêutron e μ é a massa reduzida entre o projétil e o alvo.

As probabilidades elástica e de transferência são então dadas por

$$P_{el} = \left| \langle \Phi(x) | \Psi(x, t = \infty) \rangle \right|^2; \quad P_{tr} = \left| \langle \Psi_2(x, t = \infty) | \Psi(x, t = \infty) \rangle \right|^2, \quad (3.13)$$

enquanto a probabilidade de *break up* é

$$P_{bu} = 1 - P_{el} - P_{tr}. \quad (3.14)$$

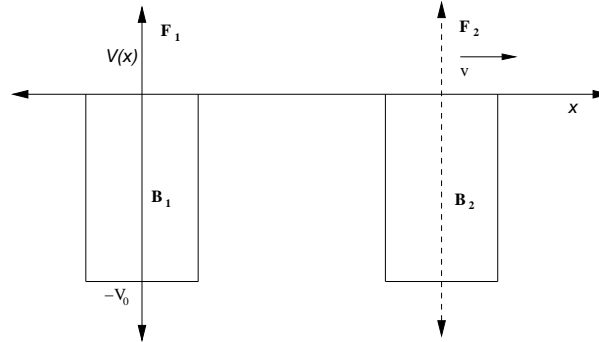


Figura 3.2: Sistemas de referência usados nos cálculos da Ref. [6] na representação de posição. Como a colisão é descrita no referencial do projétil, F_1 fica fixo no seu centro enquanto F_2 acompanha o movimento do alvo.

3.2 Nosso modelo

A resolução da equação de Schrödinger na representação de posição tem a vantagem de incluir integralmente os efeitos do contínuo nas seções de choque elástica e de transferência. Entretanto, o método usado não permite um estudo mais detalhado dos efeitos do contínuo. Seria desejável estabelecer quais estados no contínuo afetam mais fortemente a seção de choque de transferência. Este é o propósito do modelo proposto no presente trabalho.

Nosso modelo é uma generalização do modelo de dois níveis discutido na seção 3.1.1. Como na seção 3.1.1, expandimos a função de onda $\Psi(x, t)$ em uma família de estados adiabáticos e obtemos a evolução temporal dos coeficientes da expansão resolvendo a equação de Schrödinger dependente do tempo. A diferença é que, além dos estados ligados dos poços de potencial, incluímos também estados no contínuo. Introduzimos o contínuo na aproximação mais simples possível, através de um único estado para cada paridade. Para mantermos finitos os elementos de matriz que aparecem nos cálculos, em vez de um auto-estado do Hamiltoniano, tomamos pacotes de onda. A generalização deste procedimento para um conjunto de muitos pacotes no contínuo, como é feito no CDCC, não apresenta dificuldades fundamentais, embora os procedimentos numéricos fiquem mais complexos.

Consideramos aqui a mesma reação da Ref. [6], utilizando as mesmas interações e parâmetros das seções anteriores. Entretanto, para simplificar os cálculos, tomamos os poços quadrados no limite $V_0 \rightarrow \infty$ e $d \rightarrow 0$. Este limite é tomado de modo a manter constante a energia do estado ligado. Neste caso, podemos expressar os potenciais como deltas de Dirac. Esta situação está representada na Figura 3.3. Esta aproximação tem a vantagem de levar a cálculos semi-analíticos.

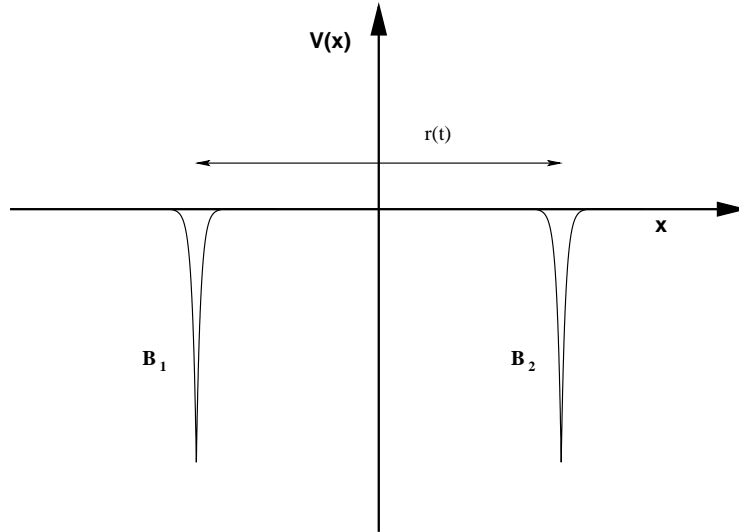


Figura 3.3: Esquema do potencial efetivo sentido pelo nêutron adotado em nosso modelo para a reação de transferência $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F} \rightarrow ^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$.

Nas seções que se seguem, discutiremos os detalhes do nosso modelo.

Estado ligado em um potencial tipo delta

Inicialmente consideramos a equação de Schrödinger estacionária para um único potencial delta, localizado na origem do sistema de coordenadas. Deste modo, escrevemos o potencial na forma,

$$V(x) = -\frac{V_0}{\kappa} \delta(x). \quad (3.15)$$

Acima, o fator κ tem dimensões do inverso da distância e foi introduzido para que o parâmetro V_0 tivesse dimensões de energia. Queremos agora determinar o valor de V_0 para que exista um único estado ligado em cada poço e que sua energia seja $\varepsilon = -B$, com B representando a energia de separação do nêutron de massa m .

Partimos então da equação de Schrödinger

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + V(x) \varphi(x) = -B \varphi(x). \quad (3.16)$$

Introduzindo as notações

$$\kappa = \frac{\sqrt{2mB}}{\hbar}; \quad \rho = \kappa x, \quad (3.17)$$

a eq.(3.16) tem a forma

$$\varphi''(\rho) = \left(1 + \frac{V(\rho)}{B}\right) \varphi(\rho), \quad (3.18)$$

com $\varphi''(\rho) = d^2\varphi(\rho)/d\rho^2$. Consideremos agora a eq.(3.16) para o potencial delta da eq.(3.15). Isto é: $V(x) = -\frac{V_0}{\kappa} \delta(x) = -V_0 \delta(\rho)$. A relação anterior fica,

$$\varphi''(\rho) = \varphi(\rho) - \frac{V_0}{B} \delta(\rho) \varphi(\rho). \quad (3.19)$$

Integrando os dois lados da equação no intervalo infinitesimal $[-\epsilon, +\epsilon]$ e tomando o limite $\epsilon \rightarrow 0$ obtemos

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{[\varphi'(\rho)]_{-\epsilon}^{\epsilon}\} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \varphi(\rho) d\rho \right\} - \frac{V_0}{B} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_{-\epsilon}^{+\epsilon} \varphi(\rho) \delta(\rho) d\rho \right\}. \quad (3.20)$$

Lembramos agora que a solução estacionária normalizada para a equação de Schrödinger para um potencial delta é

$$\varphi(x) = e^{-|\rho|}. \quad (3.21)$$

A partir deste resultado, obtemos

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{[\varphi'(\rho)]_{-\epsilon}^{\epsilon}\} = -2. \quad (3.22)$$

Usando este resultado e a propriedade da função delta de Dirac,

$$\int_a^b f(x) \delta(x - x_0) dx = \begin{cases} f(x_0) & x_0 \in [a, b], \\ 0 & \text{em outro caso} \end{cases}$$

obtemos

$$V_0 = 2 B. \quad (3.23)$$

3.2.1 Cálculos sem o contínuo

Começamos por analisar a colisão quando não incluímos estados no contínuo. Neste caso, os cálculos com o nosso modelo são semelhantes aos de Marta *et al.* [6] na aproximação de dois níveis, discutidos na seção 3.1.1. Entretanto há algumas diferenças importantes, que destacamos a seguir.

A primeira diferença está nos estados ligados utilizados na expansão da função de onda do nêutron. Na seção 3.1.1, foram utilizados auto-funções do Hamiltoniano adiabático com o poço duplo, que satisfazem à equação,

$$H \phi_b^{(\pm)}(x, t) = E_{\pm}(t) \phi_b^{(\pm)}(x, t). \quad (3.24)$$

Notem que os auto-valores adiabáticos $E_{\pm}(t)$ dependem do tempo através da distância entre os poços, dada pela trajetória clássica. O estado fundamental é o simétrico ($E_+(t)$). Nos limites $t \rightarrow \pm\infty$ os núcleos estão muito afastados e estes estados se degeneram. Isto é, $E_+(t \rightarrow \pm\infty) = E_-(t \rightarrow \pm\infty) = -B$. Como vimos na seção 3.1.1, os estados em que o nêutron está ligado ao projétil, ψ_1 , ou ao alvo, ψ_2 , estão relacionados com os estados acima pelas equações

$$\begin{aligned}\phi_b^{(+)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_2(x, t) + \psi_1(x, t) \right), \\ \phi_b^{(-)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\psi_2(x, t) - \psi_1(x, t) \right).\end{aligned}\tag{3.25}$$

No presente trabalho, expandimos a função de onda do nêutron em termos de estados adiabáticos do Hamiltoniano com um poço simples. Usando a notação,

$$H_1 = T + V_1(x, t); \quad H_2 = T + V_2(x, t),$$

com

$$V_1(x, t) = -\frac{V_0}{\kappa} \delta\left(x + \frac{1}{2}r(t)\right); \quad V_2(x, t) = -\frac{V_0}{\kappa} \delta\left(x - \frac{1}{2}r(t)\right),$$

construímos inicialmente os orbitais adiabáticos $\chi_1(x, t)$ e $\chi_2(x, t)$, que seguem o movimento de um dos poços de potencial sem serem influenciados pela presença do outro. Estes satisfazem às equações

$$H_i \chi_i(x, t) = -B \chi_i(x, t); \quad i = 1, 2.$$

Estes orbitais correspondem à função de onda da eq.(3.21), transladada de $\pm r(t)/2$. Eles são dados por

$$\begin{aligned}\chi_1(x, t) &= \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x+r(t)/2|}, \\ \chi_2(x, t) &= \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x-r(t)/2|}.\end{aligned}\tag{3.26}$$

Para descrever a função de onda do nêutron construímos o estado simétrico e o anti-simétrico a partir de $\chi_1(x, t)$ e $\chi_2(x, t)$, de modo análogo à eq.(3.25). Isto é,

$$\begin{aligned}\varphi_b^{(+)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_2(x, t) + \chi_1(x, t) \right), \\ \varphi_b^{(-)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_2(x, t) - \chi_1(x, t) \right).\end{aligned}\tag{3.27}$$

Esta base tem a vantagem de levar a expressões mais simples para os elementos de matriz que devem ser calculados para a evolução temporal da colisão. Embora as funções desta seção sejam

diferentes das mencionadas na seção 3.1.1, elas coincidem para os estágios inicial e final da colisão:

$$\begin{aligned}\phi_b^{(\pm)}(x, t \rightarrow \pm\infty) &= \varphi_b^{(\pm)}(x, t \rightarrow \pm\infty), \\ \psi_{1,2}(x, t \rightarrow \pm\infty) &= \chi_{1,2}(x, t \rightarrow \pm\infty).\end{aligned}$$

Na Figura 3.4 representamos por linhas cheias as funções $\varphi_b^{(+)}$ ((a) e (c)) e $\varphi_b^{(-)}$ ((b) e (d)) para as separações $r(t) = 150$ fm ((a) e (b)) e $r(t) = 15$ fm ((c) e (d)). Mostramos também as funções $\phi_b^{(+)}$ e $\phi_b^{(-)}$ correspondentes (linhas tracejadas). No caso de grandes separações ((a) e (b)), $\phi_b^{(\pm)}$ e $\varphi_b^{(\pm)}$ se confundem. Por outro lado, quando os poços de potencial estão próximos ((c) e (d)), elas são diferentes.

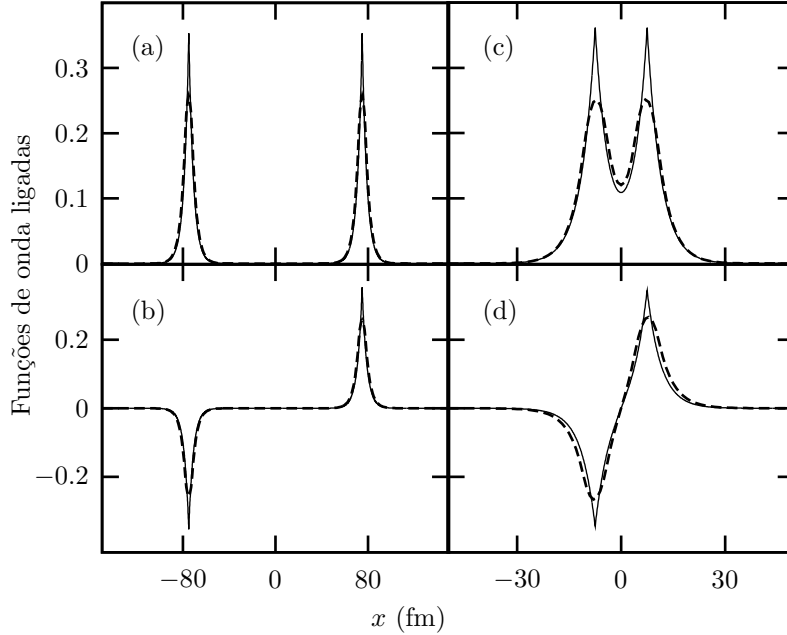


Figura 3.4: Comparação das funções de ondas adiabáticas do presente trabalho (linhas cheias), $\varphi_b^{(\pm)}$, com as utilizadas na Ref. [6] (linhas tracejadas), $\phi_b^{(\pm)}$. As funções pares ($\varphi_b^{(+)}$ e $\phi_b^{(+)}$) são mostradas em (a) e (c) e as ímpares ($\varphi_b^{(-)}$ e $\phi_b^{(-)}$) em (b) e (d). Os resultados são apresentados para dois valores da distância entre os poços de potencial: $r = 150$ fm ((a) e (b)) e $r = 15$ fm ((c) e (d)).

Uma segunda diferença entre os cálculos desta seção e cálculos de dois níveis de Marta *et al.* [6] é a trajetória clássica adotada. Enquanto nós utilizamos trajetórias de Rutherford, eles usam uma aproximação parabólica, que corresponde a uma expansão de segunda ordem em torno do ponto de retorno clássico. Na Figura 3.5 comparamos a trajetória parabólica usada em [6] com a de Rutherford, em uma colisão de ^{27}F com ^{26}F na energia $E_{c.m.} = 8$ MeV. Mostramos as trajetórias entre a separação máxima de 150 fm e a mínima, que neste caso é $\simeq 15$ fm. Nas vizinhanças da aproximação máxima, as duas trajetórias são indistinguíveis. Quando estados no contínuo não são

incluídos nos cálculos, o nêutron é transferido em torno da aproximação máxima. Por este motivo, a aproximação empregada no cálculo de dois níveis na Ref. [6] é justificada. Entretanto, quando acoplamentos com estados no contínuo são levados em conta, a situação é diferente. Neste caso, a transferência pode ocorrer através de um processo de segunda ordem quando a distância entre projétil e alvo é bem maior. A aproximação parabólica é então inadequada.

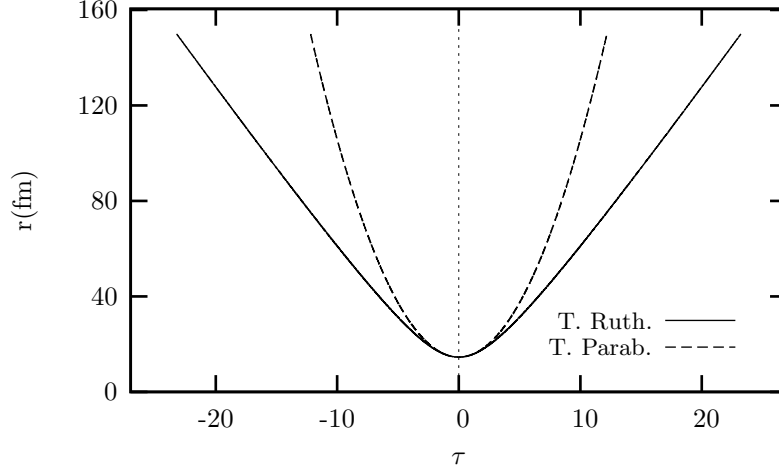


Figura 3.5: Comparação entre a trajetória parabólica e a de Rutherford, calculadas no sistema centro de massa para $^{27}\text{F}+^{26}\text{F}$, com $E_{c.m.}$ igual a 8 MeV. No eixo- x , o tempo é expresso em unidades arbitrárias.

Nosso objetivo agora é achar as equações de canais acoplados análogas a (3.9) e, a partir de sua solução, determinar as probabilidades elásticas e de transferência do nêutron. Para isto, expandimos o estado do nêutron como

$$\Psi(x, t) = b_+(t)e^{-iE_0t/\hbar}\varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t)e^{-iE_0t/\hbar}\varphi_b^{(-)}(x, t). \quad (3.28)$$

As fases $\exp(-iE_0t/\hbar)$ foram introduzidas na expansão por conveniência. Deste modo, as amplitudes b_+ e b_- têm valores constantes no final da colisão ($t \rightarrow \infty$). Em seguida, inserimos esta expansão na equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x, t) = H\Psi(x, t), \quad (3.29)$$

com o hamiltoniano

$$H = T - \frac{V_0}{\kappa}\delta(x + r(t)/2) - \frac{V_0}{\kappa}\delta(x - r(t)/2). \quad (3.30)$$

Tomando produtos escalares com $|\varphi_b^{(\pm)}\rangle$, obtemos as equações diferenciais no espaço de kets

$$i\hbar \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle \frac{db_+}{dt} = \left[\langle \varphi_b^{(+)} | \hat{H} | \varphi_b^{(+)} \rangle - E_0 \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle - i\hbar \dot{r} \langle \varphi_b^{(+)} | \frac{\partial \varphi_b^{(+)}}{\partial r} \rangle \right] b_+$$

e

$$i\hbar \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle \frac{db_-}{dt} = \left[\langle \varphi_b^{(-)} | \hat{H} | \varphi_b^{(-)} \rangle - E_0 \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle - i\hbar \dot{r} \langle \varphi_b^{(-)} | \frac{\partial \varphi_b^{(-)}}{\partial r} \rangle \right] b_- .$$

Como o Hamiltoniano conserva paridade e estados de paridade diferente são ortogonais, obtemos equações independentes para o coeficiente de cada paridade. É importante observar que os estados $\varphi_b^{(\pm)}$ só são normalizados assintoticamente. Usando a eq.(3.27), temos

$$\langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{2} [\langle \chi_2 | \chi_2 \rangle + \langle \chi_1 | \chi_1 \rangle \pm 2\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle] \quad (3.31)$$

como os estados χ_1 e χ_2 são normalizados, obtemos

$$\langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = 1 \pm \langle \chi_2 | \chi_1 \rangle. \quad (3.32)$$

Quando a distância entre os poços é muito maior que a extensão dos orbitais, $\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle \simeq 0$. Neste caso, os estados $\varphi_b^{(\pm)}$ são normalizados. Mas em separações menores isto não acontece.

Como em nossos cálculos $r(t)$ é descrita por uma trajetória de Rutherford. Neste caso, é conveniente utilizar a variável, w introduzida na seção 2.1.1 para descrever a evolução temporal. Fazemos a transformação [8]

$$t = \frac{a}{v_\infty} [\varepsilon \sinh w + w]; \quad r = a [\varepsilon \cosh w + 1], \quad (3.33)$$

onde $a = r_{ca}/2$ é a metade da distância de aproximação máxima em uma trajetória de Rutherford frontal, v_∞ é a velocidade assintótica do movimento projétil-alvo e ε é o parâmetro de excentricidade da trajetória. Nas colisões frontais, que consideramos em nosso trabalho, $\varepsilon = 1$. Para escrever as equações diferenciais em termos da nova variável, usamos as relações

$$\begin{aligned} \hbar \frac{d}{dt} &= \left(\hbar \frac{dw}{dt} \right) \frac{d}{dw} = \left(\frac{\varepsilon_0}{\cosh w + 1} \right) \frac{d}{dw} \\ \hbar \dot{r} &= \hbar \frac{dr/dw}{dt/dw} = \left(\frac{\varepsilon_0 \sinh w}{\cosh w + 1} \right) a, \end{aligned} \quad (3.34)$$

onde

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar v_\infty}{a} \quad (3.35)$$

é a escala de energia característica da colisão. Obtemos então as equações

$$\begin{aligned} i \mathcal{N}_{bb}^{(+)}(w) \dot{b}_+(w) &= \left[(\cosh w + 1) \frac{\mathcal{H}_{bb}^{(+)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(+)}(w)}{\varepsilon_0} - i \sinh w D_{bb}^{(+)}(w) \right] b_+(w), \\ i \mathcal{N}_{bb}^{(-)}(w) \dot{b}_-(w) &= \left[(\cosh w + 1) \frac{\mathcal{H}_{bb}^{(-)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(-)}(w)}{\varepsilon_0} - i \sinh w D_{bb}^{(-)}(w) \right] b_-(w). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Usamos acima as notações

$$\dot{b}_\pm(w) = \frac{db_\pm}{dw}, \quad (3.37)$$

$$\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(w) = \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle, \quad (3.38)$$

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}(w) = \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle, \quad (3.39)$$

$$D_{bb}^{(\pm)}(w) = a \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle. \quad (3.40)$$

Os cálculos detalhados das funções $\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}$, $\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}$ e $\mathcal{D}_{bb}^{(\pm)}$ são apresentados no apêndice B.

Probabilidades elástica e de transferência

Para calcular as probabilidades desejadas, resolvemos as eqs.(3.36) com condições iniciais apropriadas. Como antes da colisão o nêutron estava ligado no *core* B₁, ele estava no estado χ_1 . Usando a eq.(3.27), podemos escrever

$$\begin{aligned} \chi_1(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_b^{(+)}(x, t) - \varphi_b^{(-)}(x, t) \right), \\ \chi_2(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\varphi_b^{(+)}(x, t) + \varphi_b^{(-)}(x, t) \right). \end{aligned} \quad (3.41)$$

Portanto, os coeficientes iniciais na expansão da eq.(3.28) são

$$b_+(t \rightarrow -\infty) = \frac{1}{\sqrt{2}}; \quad b_-(t \rightarrow -\infty) = -\frac{1}{\sqrt{2}}.$$

A evolução temporal dos coeficientes b_\pm é obtida integrando cada uma das equações diferenciais em (3.36) até valores de w onde a distância r é suficientemente grande e as amplitudes b_\pm atingem valores constantes. As probabilidades elástica e de transferência são então determinadas projetando $\Psi(x, t \rightarrow \infty)$ nos estados χ_1 e χ_2 , que nestas circunstâncias já são iguais a ψ_1 e ψ_2 . Como em

grandes distâncias os estados $\varphi_b^{(\pm)}$ estão normalizados, obtemos

$$P_{el} = |\langle \chi_1(t \rightarrow \infty) | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle|^2 = \frac{1}{2} |b_+(w \rightarrow \infty) - b_-(w \rightarrow \infty)|^2, \quad (3.42)$$

$$P_{tr} = |\langle \chi_2(t \rightarrow \infty) | \Psi(t \rightarrow \infty) \rangle|^2 = \frac{1}{2} |b_+(w \rightarrow \infty) + b_-(w \rightarrow \infty)|^2. \quad (3.43)$$

3.2.2 Efeitos do contínuo

As dificuldades para incluir efeitos do contínuo na colisão vêm de dois fatores. Primeiramente, o contínuo contém um número infinito de estados, rotulados por um índice contínuo. Além disso, estes estados têm alcances infinitos. Por isso, elementos de matriz entre dois destes estados divergem. A forma usual de contornar este problema é aproximar o contínuo por um conjunto de pacotes de onda. Embora estes pacotes tenham longo alcance (inversamente proporcional à largura do pacote no espaço de momento) este alcance se mantém finito. Esta idéia foi usada em cálculos quânticos pelo método CDCC [4, 5, 19] e em cálculos semiclássicos [20] como no presente trabalho.

Nesta seção fazemos uma extensão da idéia da seção anterior, onde a função de onda foi expandida em um estado par e outro ímpar. Aqui, incluímos também na expansão um estado no contínuo de cada paridade. A generalização para um contínuo discretizado como um conjunto de estados não apresenta grandes problemas do ponto de vista formal. Entretanto, como ele acarreta dificuldades numéricas, restringimos nossos cálculos a um único estado por paridade, e estudamos a influência de sua energia nas probabilidades elástica e de transferência.

Discretização do Contínuo

Para investigar os efeitos do contínuo nas probabilidades elástica e de transferência, foram introduzidos os pacotes

$$\varphi_c^{(+)}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \Gamma(k) \chi_k^{(+)}(x), \quad (3.44)$$

$$\varphi_c^{(-)}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \Gamma(k) \chi_k^{(-)}(x), \quad (3.45)$$

onde

$$\chi_k^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos kx,$$

$$\chi_k^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin kx,$$

e

$$\Gamma(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta k}} & k_0 - \frac{\Delta k}{2} \leq k \leq k_0 + \frac{\Delta k}{2}, \\ 0 & \text{em outro caso.} \end{cases} \quad (3.46)$$

Estes pacotes, correspondem à parte simétrica e à parte anti-simétrica de um estado discretizado da Ref. [20]. Na equação acima, k_0 e Δ_k correspondem ao o centro e a largura do pacote. Estas quantidades são parâmetros do cálculo e nosso objetivo é investigar como a escolha destes parâmetros influencia as probabilidades calculadas. Usando as expressões

$$\begin{aligned}\delta(k - k') &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{sen } kx \text{ sen } k'x \, dx, \\ \delta(k - k') &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{cos } kx \text{ cos } k'x \, dx,\end{aligned}\tag{3.47}$$

concluimos que dois destes estados, com a mesma paridade ou paridades diferentes, são ortonormais entre si ou seja, $\langle \varphi_{c,i} | \varphi_{c,j} \rangle = \delta_{ij}$.

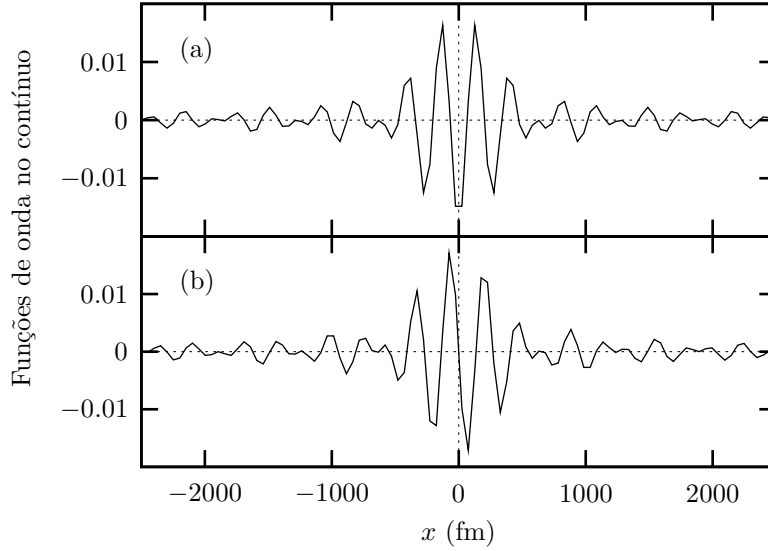


Figura 3.6: Pacotes de onda (a) $\varphi_c^{(+)}$ e (b) $\varphi_c^{(-)}$, utilizados na descrição do contínuo. Os parâmetros adotados são $k_0 = 0.35 \text{ fm}^{-1}$ e $\Delta_k = 0.01 \text{ fm}^{-1}$.

As Figuras 3.6 e 3.7 apresentam a simetria por inversão de x por $-x$ destes estados do contínuo. Estas foram obtidas com o mesmo centro do pacote mas com larguras diferentes. Vemos que a extensão do pacote aumenta quando a largura diminui. Este comportamento resulta do princípio da incerteza.

Equações diferenciais acopladas

Para obter a evolução temporal da função de onda, generalizamos a expansão da eq.(3.28) na forma

$$\begin{aligned}\Psi(x, t) &= b_+(t) e^{-iE_0 t/\hbar} \varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t) e^{-iE_0 t/\hbar} \varphi_b^{(-)}(x, t) \\ &+ c_+(t) e^{-iE_c t/\hbar} \varphi_c^{(+)}(x) + c_-(t) e^{-iE_c t/\hbar} \varphi_c^{(-)}(x),\end{aligned}\tag{3.48}$$

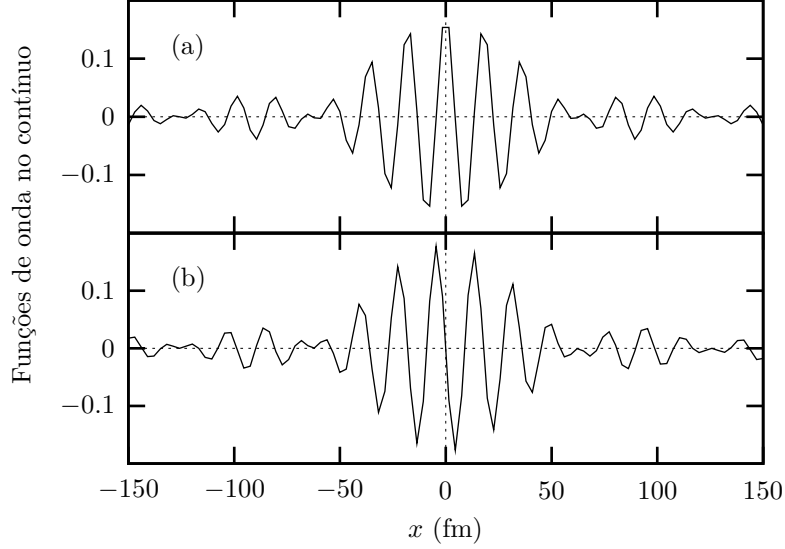


Figura 3.7: Os mesmos pacotes da figura anterior, com o mesmo k_0 , mas com a largura $\Delta_k = 0.1 \text{ fm}^{-1}$.

com $E_c = \hbar^2 k_0^2 / 2m$. Como na seção anterior, introduzimos fases para cada coeficiente. Embora elas não sejam necessárias, elas colocam as equações em uma forma mais simétrica. Procedemos então como na seção anterior: inserimos a expansão na equação de Schrödinger dependente do tempo e depois multiplicamos escalarmente pelas funções $\exp[iE_0 t / \hbar] \langle \varphi_b^{(\pm)} |$ e $\exp[iE_c t / \hbar] \langle \varphi_c^{(\pm)} |$. Deste modo, obtemos as equações

$$\begin{aligned}
 i\hbar \left[\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(t) \frac{db_{\pm}(t)}{dt} + e^{-i\Omega t} \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(t) \frac{dc_{\pm}(t)}{dt} \right] = \\
 \left[\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}(t) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(t) - i\hbar \frac{\dot{r}}{a} \mathcal{D}_{bb}^{(\pm)}(t) \right] b_{\pm}(t) \\
 + e^{-i\Omega t} \left[\mathcal{H}_{bc}^{(\pm)}(t) - E_c \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(t) \right] c_{\pm}(t), \tag{3.49}
 \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
 i\hbar \left[e^{i\Omega t} \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(t) \frac{db_{\pm}(t)}{dt} + \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(t) \frac{dc_{\pm}(t)}{dt} \right] = \\
 e^{i\Omega t} \left[\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)}(t) - E_c \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(t) - i\hbar \frac{\dot{r}}{a} \mathcal{D}_{cb}^{(\pm)}(t) \right] b_{\pm}(t) \\
 + \left[\mathcal{H}_{cc}^{(\pm)}(t) - E_c \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(t) \right] c_{\pm}(t). \tag{3.50}
 \end{aligned}$$

Usando a notação

$$\Omega = \frac{E_c - E_0}{\hbar} = \frac{\Delta E}{\hbar}. \tag{3.51}$$

Podemos expressar estas equações em termos da variável w . Procedendo de modo análogo à

seção anterior, elas podem ser colocadas na forma,

$$A_{bb}^{(\pm)} \dot{b}_{\pm}(w) + A_{bc}^{(\pm)} \dot{c}_{\pm}(w) = B_{bb}^{(\pm)} b_{\pm}(w) + B_{bc}^{(\pm)} c_{\pm}(w), \quad (3.52)$$

$$A_{cb}^{(\pm)} \dot{b}_{\pm}(w) + A_{cc}^{(\pm)} \dot{c}_{\pm}(w) = B_{cb}^{(\pm)} b_{\pm}(w) + B_{cc}^{(\pm)} c_{\pm}(w), \quad (3.53)$$

com

$$A_{bb}^{(\pm)} = \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(w), \quad A_{cc}^{(\pm)} = \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(w) = 1, \quad (3.54)$$

$$A_{bc}^{(\pm)} = e^{-i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(w), \quad A_{cb}^{(\pm)} = e^{i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(w), \quad (3.55)$$

$$B_{bb}^{(\pm)} = -i (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right) - \sinh w \mathcal{D}_{bb}^{(\pm)}(w), \quad (3.56)$$

$$B_{bc}^{(\pm)} = -i e^{-i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{bc}^{(\pm)}(w) - E_c \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right), \quad (3.57)$$

$$B_{cb}^{(\pm)} = -i e^{i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right), \quad (3.58)$$

$$- e^{i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} \sinh w \mathcal{D}_{cb}^{(\pm)}(w),$$

$$B_{cc}^{(\pm)} = -i (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{cc}^{(\pm)}(w) - E_c \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right). \quad (3.59)$$

As funções $\mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}$, $\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)}$ e $\mathcal{D}_{cb}^{(\pm)}$, que são definidas de modo análogo à seção anterior, são calculadas no apêndice B.

Probabilidades elástica, de transferência e de *breakup*

Analogamente à seção anterior, projetamos a função de onda $\Psi(x, t \rightarrow \infty)$ nos orbitais ligados a cada um dos poços, χ_1 e χ_2 , para obter as probabilidades elástica e de transferência. Levando em consideração que os termos com distintas paridades se cancelam, temos

$$P_{el} = \frac{1}{2} \left| b_+ \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle - b_- \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle + c_+ \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_c^{(+)} \rangle - c_- \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_c^{(-)} \rangle \right|^2, \quad (3.60)$$

$$P_{tr} = \frac{1}{2} \left| b_+ \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle + b_- \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle + c_+ \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_c^{(+)} \rangle + c_- \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_c^{(-)} \rangle \right|^2, \quad (3.61)$$

com b_{\pm} e c_{\pm} calculados no final da colisão ($t \rightarrow \infty$). Considerando que as relações para os produtos internos $\langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle$, $\langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle$, $\langle \varphi_c^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle$ e $\langle \varphi_c^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle$ são assintoticamente um e zero, concluímos que as probabilidades elástica e de transferência são dadas pelas mesmas relações da seção anterior. Entretanto, os resultados são diferentes já que o contínuo afeta a evolução temporal dos coeficientes b_{\pm} .

3.2.3 Resultados para as probabilidades

Vamos agora calcular as probabilidades elástica, P_{el} , e de transferência, P_{tr} , como função da energia da colisão, $E_{c.m.}$, calculadas no sistema centro de massa de três formas diferentes. Em primeiro lugar vamos considerar nossos resultados quando não incluímos estados no contínuo (subseção 3.2.1) e quando incluímos um estado no contínuo por paridade (subseção 3.2.2), e vamos comparar os dois com os obtidos por Marta *et al.*, para a solução de coordenadas no limite de poços delta (subseção 3.1.2). O objetivo desses cálculos será verificar até que ponto a aproximação do contínuo por um único canal pode ser adequada. A nossa descrição do canal que representa o contínuo tem dois parâmetros: a energia média da faixa de energias incluídas no canal, e a largura desta faixa. Portanto vamos estudar como dependem as probabilidades calculadas desses dois parâmetros.

Poderia se imaginar que o contínuo estará melhor descrito quanto mais extensa for esta faixa de energias, já que aparentemente mais possibilidades de excitação estarão sendo incluídas. Vamos ver que isto não é assim, e que o resultado é bastante diferente. A inclusão de apenas um canal não consegue, no caso que estamos considerando, melhorar apreciavelmente os resultados em comparação com os cálculos que desconsideram completamente o contínuo. No final desta seção vamos analisar porquê isto acontece, e como pode ser solucionado.

Nossos cálculos foram realizados utilizando o código numérico *wpacket.f* implementado por nós (apêndice D). Cada estado no contínuo por paridade tem a mesma largura, Δ_k , e energia associada ao centro do pacote E_c . Além disso, os cálculos são efetuados até uma separação máxima $r_{m\acute{a}x}$ entre os núcleos, na qual eles estão afastados de tal forma que a presença de um não influencia na do outro. Estas distâncias foram determinadas verificando que as probabilidades calculadas não variaram de forma considerável além destes valores.

Em todas as figuras a serem mostradas o sistema de estudo é $^{27}\text{F}+^{26}\text{F}$ numa colisão frontal, a energia de ligação do nêutron $-B$ é de 1.3 MeV e a trajetória clássica adotada para o movimento relativo é a de Rutherford, parametrizada em termos da variável w , mencionada anteriormente. As curvas cheias apresentam os cálculos sem contínuo, as tracejadas indicadas como E. Coord., mostram a solução no espaço de coordenadas no limite de poços delta de Dirac, e as demais tracejadas exibem cálculos com diferentes valores dos parâmetros que definem o canal no contínuo.

Nas Figuras 3.8 e 3.9 realizamos essas comparações para as probabilidades elásticas e de transferência. Nelas o canal do contínuo é descrito para um valor médio da energia, E_c , e variando a largura Δ_k . A parte superior das figuras (gráficos (a) e (b)) mostram as curvas para valores da largura do pacote Δ_k iguais a 0.2, 0.1 e 0.05 fm⁻¹ para energias E_c de 0.07 e 0.62 MeV, respectivamente. No caso $E_c = 0.07$ MeV, não incluímos o valor para Δ_k de 0.2 fm⁻¹, já que, para esta

situação $\Delta_k/2$ é maior do que o centro do pacote, k_0 , e portanto estaríamos incluindo energias negativas no contínuo. A parte inferior das figuras (gráficos (c) e (d)) apresentam os estados no contínuo para valores E_c de 2.56 e 3.34 MeV com Δ_k de 0.1 e 0.7 fm^{-1} , além do valor da largura que é igual ao centro do pacote k_0 .

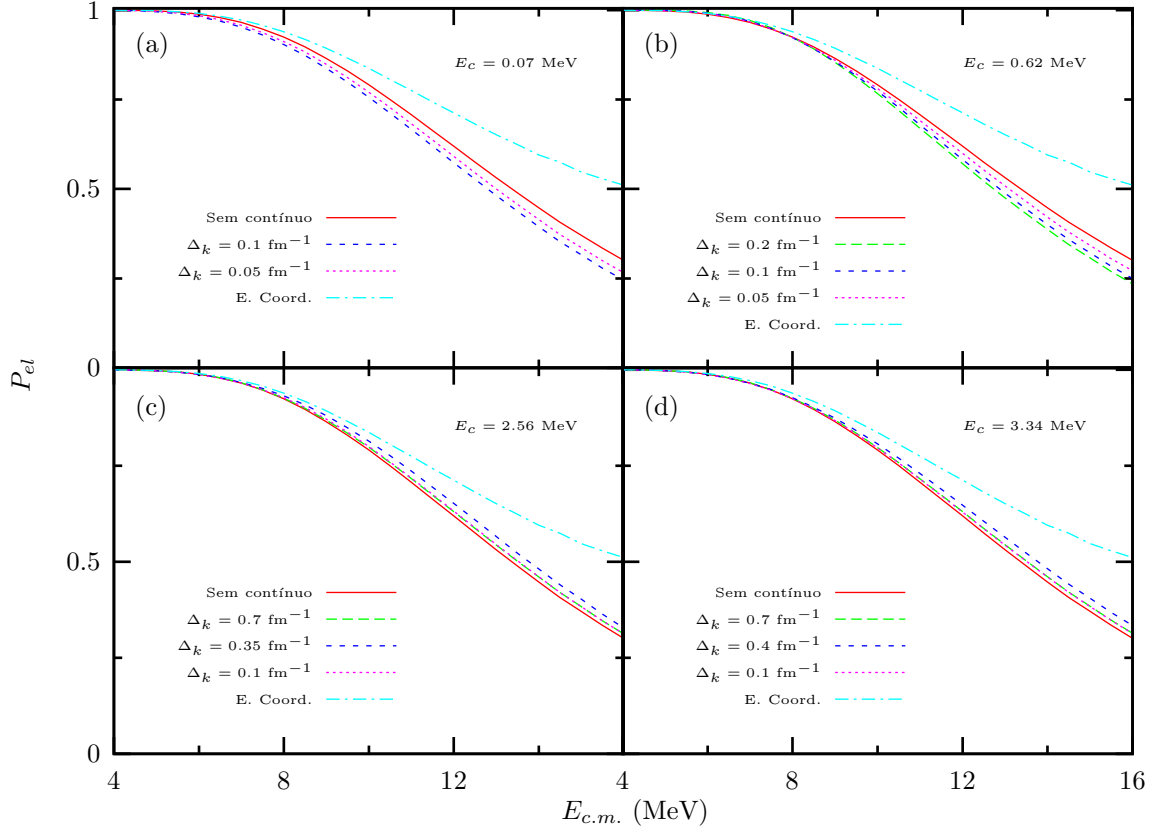


Figura 3.8: Comparação da probabilidade elástica como função da energia de colisão calculada no sistema centro de massa, $E_{c.m.}$, quando os cálculos não apresentam estados no contínuo (curva cheia) com os cálculos que têm um estado no contínuo por paridade (curvas tracejadas com Δ_k) e com a solução no espaço de coordenadas (E. Coord.) segundo [6] no limite para potenciais tipo delta de Dirac. As curvas que envolvem estados no contínuo mostram como varia o comportamento mantendo fixo o valor da energia relacionada ao centro do pacote E_c para diferentes valores da largura do pacote Δ_k . Para estas a energia de separação do nêutron $-B$ é igual a 1.3 MeV, assim como para o cálculo sem contínuo. Em todos os casos o sistema é $^{27}\text{F}+^{26}\text{F}$ numa colisão frontal, seguindo uma trajetória de Rutherford. Nos gráficos (a) e (b) a distância máxima entre os centros dos poços $r_{\text{máx}}$ é igual a 2500 fm. Enquanto para os casos (c) e (d) é de 150 fm.

Observando as Figuras 3.8 e 3.9, vemos que independentemente das larguras Δ_k e da energia média E_c , as curvas que incluem um estado no contínuo por paridade ficam muito próximas das que não o incluem. Note-se, em particular, que os resultados obtidos para o maior valor da largura do estado do contínuo, $\Delta_k = 0.7 \text{ fm}^{-1}$ não levam às melhores aproximações. Disto podemos inferir que para uma adequada descrição do contínuo com um estado por paridade, utilizar um valor

maior para a largura do pacote de energia que representa o estado, não é suficiente. Além disso, da Figura 3.9 podemos observar que a diferença entre o cálculo incluindo um estado no contínuo por paridade com a solução no espaço de coordenadas é muito maior para probabilidades de transferência do que para as elásticas, já que esta última apresenta um máximo a altas energias do centro de massa ($E_{c.m.} \sim 13.8$ MeV). Este se encontra relacionado com um início prematuro do processo de transferência na colisão (aumento da probabilidade para $E_{c.m.} \lesssim 13.8$ MeV) de tal forma que a população do canal de transferência têm tempo de voltar ao elástico (diminuição da probabilidade para $E_{c.m.} \gtrsim 13.8$ MeV).

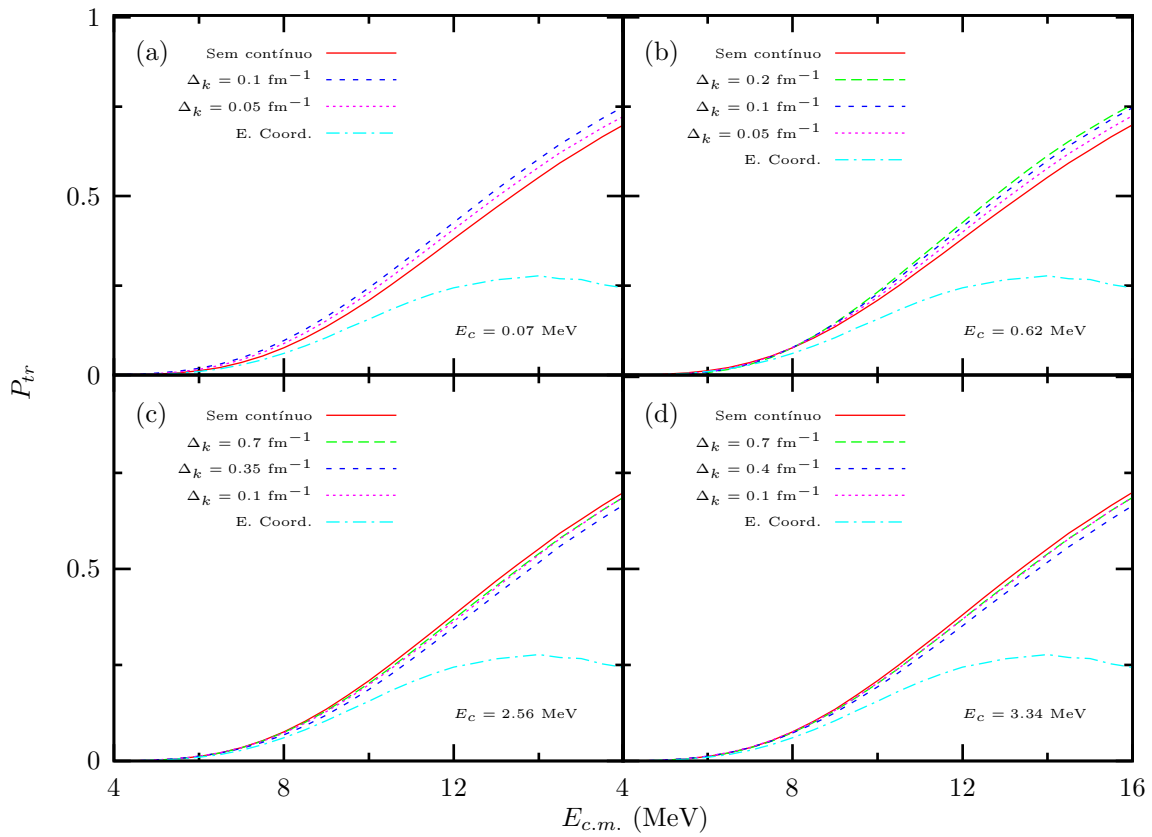


Figura 3.9: A mesma descrição da Figura 3.8 para os cálculos das probabilidades de transferência.

Por outro lado, as Figuras 3.10 e 3.11 mostram o comportamento das curvas do contínuo mantendo fixo o valor da largura do pacote Δ_k de 0.1 fm^{-1} para energias E_c de 0.07, 0.28, 0.62 e 2.51 MeV. Destas figuras podemos observar, que independentemente do valor da energia E_c , todos os resultados estão muito próximos dos que não incluem o contínuo. Estes resultados e os das Figuras 3.8 e 3.9 indicam, que no caso que estamos estudando, embora tenha algum efeito incluir um único estado no contínuo, este efeito não é o suficientemente importante como para reproduzir

corretamente os que incluem exatamente todos os canais do contínuo. Também obtemos, a partir destas figuras, assim como das Figuras 3.8 e 3.9, que o afastamento das curvas do contínuo cresce a medida que aumenta a energia da colisão $E_{c.m.}$. Isto pode ser entendido, considerando que na medida que a energia da colisão aumenta, é mais provável que o nêutron seja liberado e portanto a influência da presença do estado com $E > 0$ se torna maior.

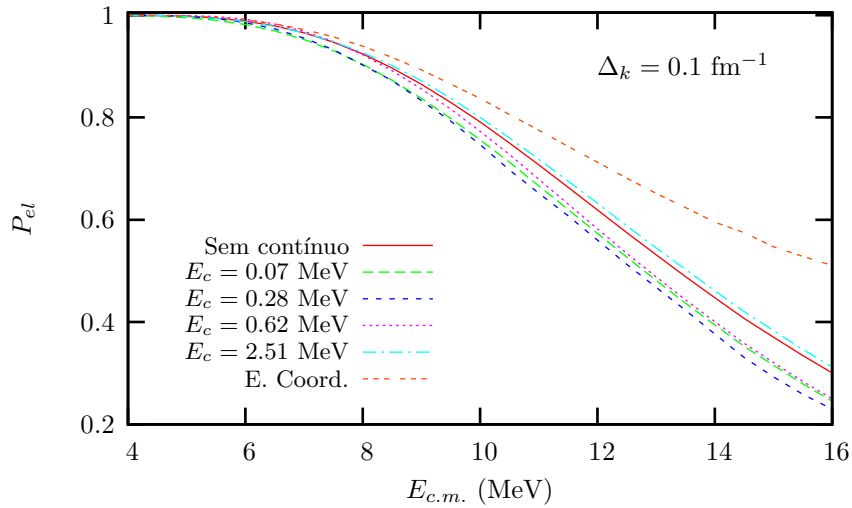


Figura 3.10: Descrição similar à da Figura 3.8 com as curvas que mostram os resultados para o modelo com um estado no contínuo mantendo fixa a largura do pacote de energia Δ_k e variando o valor da energia média do centro do pacote E_c . Para os cálculos com um estado no contínuo por paridade a distância máxima entre os centros dos poços $r_{m\acute{a}x}$ é igual a 2500 fm.

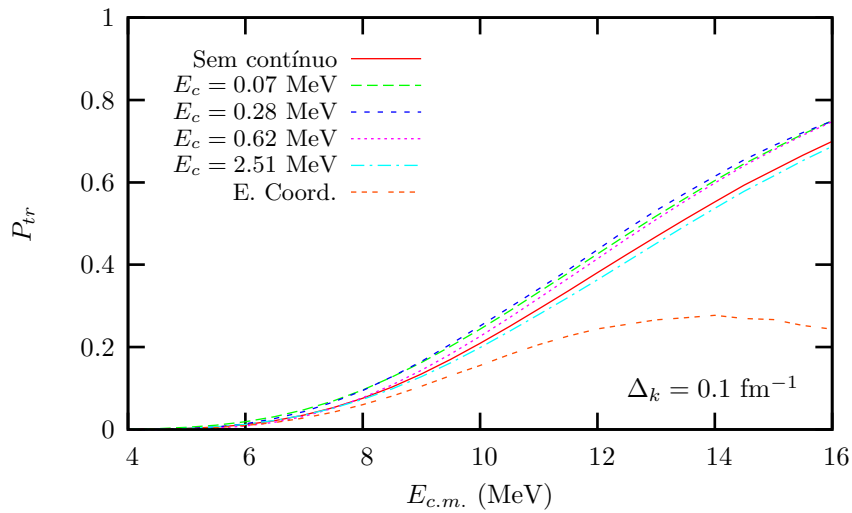


Figura 3.11: Descrição análoga à da Figura 3.10 para as probabilidades de transferência.

Por último nas Figuras 3.12 e 3.13 temos as curvas que correspondem a valores da largura do pacote igual ao valor do centro. Desta maneira, nestes cálculos consideramos faixas de energia

que vão de $E = E_c/4$ até $E = 9E_c/4$, os quais constituem os resultados que mais ficam longe da curva sem contínuo. As que incluem um estado no contínuo por paridade têm valores do centro do pacote $k_0 = 0.35, 0.4, 0.45$ e 0.5 fm^{-1} , que correspondem a energias E_c de 2.56, 3.34, 4.23 e 5.22 MeV, respectivamente. Os cálculos foram realizados até uma energia E_c próxima de 5 MeV, já que além deste valor, praticamente as curvas que incluem um estado no contínuo por paridade e a curva sem contínuo são as mesmas. Isto é como se a energia E_c do estado do contínuo fosse o suficientemente alta para eliminar sua influência. De fato, podemos mostrar analiticamente que incluir um estado do contínuo com largura infinita é equivalente a não incluir nenhum efeito do contínuo (eq.(B.5)). Isto porque ao ser muito pequena a probabilidade de achar em qualquer região os estados do contínuo, os termos de acoplamento com o estado ligado, se tornam desprezíveis.

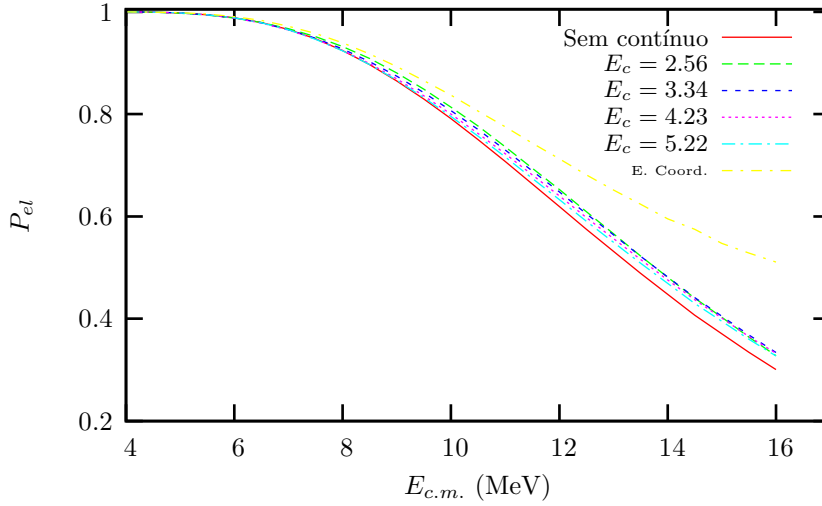


Figura 3.12: Descrição idêntica à da Figura 3.8 com as curvas que envolvem estados no contínuo mostrando como varia o comportamento quando o vetor de onda k_0 associado ao centro do pacote é igual à largura Δ_k . Para os cálculos com um estado no contínuo por paridade a distância máxima entre os centros dos poços r_{max} é igual a 150 fm.

Vemos desta maneira que a inclusão de apenas um estado no contínuo é completamente insuficiente para a descrição do processo de transferência no caso estudado. A origem do problema, que pode não ser óbvia à primeira vista, é que para o caso estudado o estado fundamental é fracamente ligado, e portanto fortemente acoplado com o contínuo. Se o contínuo é representado por apenas um estado, vamos ter um acoplamento forte entre dois estados, o que leva a oscilações nas probabilidades de ocupação dos mesmos, em termos dos parâmetros que definem o canal do contínuo. De fato observamos que o acoplamento com um único estado no contínuo pode aumentar ou diminuir a probabilidade de o nêutron ser transferido ao estado ligado. Mas quando o acoplamento com o contínuo é forte esperamos que a quebra do sistema seja irreversível, e não que volte para esse estado ligado. Diferentes energias no contínuo representam a partícula livre se movimentando com

diferentes velocidades, passando de uma a outra por causa da interação com os poços de potencial. Se o nêutron tem a liberdade de se propagar num grande número de canais, a probabilidade de que seja transferido é bem menor. De fato pode-se observar das figuras anteriores, que as curvas denominadas com "E. Coord". para as probabilidades de transferência, que incluem infinitos canais do contínuo, estão abaixo dos cálculos sem contínuo, mostrando uma diminuição da mesma. Vemos assim que, quando juntamos as energias de todos os canais em que se pode movimentar a partícula em um único canal, estamos perdendo a possibilidade de a partícula fazer essas transições em forma irreversível. Portanto esta situação pode ser resolvida subdividindo o canal considerado no contínuo num conjunto de canais.

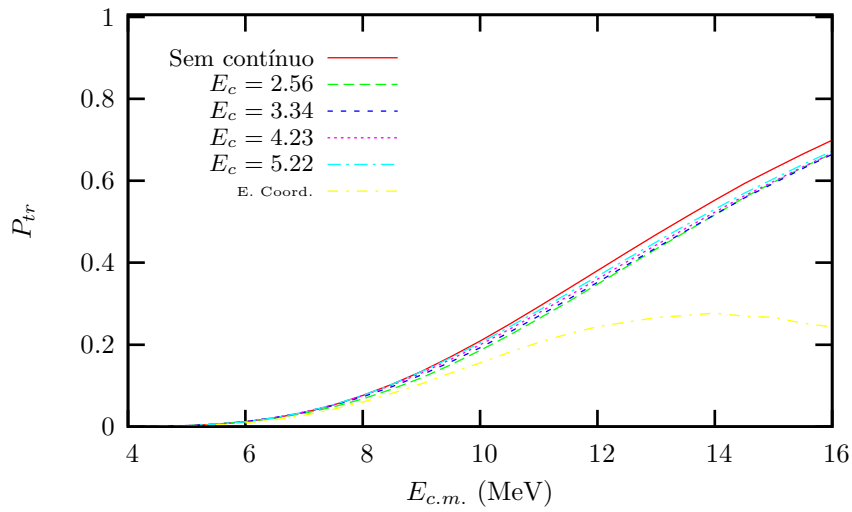


Figura 3.13: Descrição análoga à da Figura 3.12 para as probabilidades de transferência.

A situação é análoga à encontrada em outros processos, tais como a excitação Coulombiana. Enquanto o acoplamento for fraco, pode ser considerado apenas um canal de excitação, mas se o acoplamento for maior, será necessário incluir outros, em número que vai depender do valor desse acoplamento. Portanto o modelo do contínuo que desenvolvemos, em que o contínuo é descrito por um único canal, é apropriado apenas para aqueles casos em que o acoplamento é perturbativo. Por conseguinte esse tratamento pode resultar de interesse no caso de colisões entre núcleos fortemente ligados em que uma aproximação perturbativa na primeira ordem pôde resultar adequada.

3.2.4 Resultados para os potenciais de polarização

A energias em torno da barreira de Coulomb se espera que um dos canais mais importantes seja o canal de transferência. Porém, uma pergunta que surge para núcleos fracamente ligados, é se existe influência significativa da população do contínuo sobre o canal de transferência. Como foi apresentado anteriormente, podemos fazer este estudo introduzindo o potencial de polarização,

associado à contribuição dos canais que influenciam um canal em particular. Apresentamos abaixo uma aplicação do formalismo semiclássico para a determinação do potencial de polarização para o sistema $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$ em uma colisão frontal. Por meio deste, vamos analisar o canal de transferência e o efeito da população do contínuo sobre ele. Para isto, faremos uma comparação do potencial de polarização calculado quando não incluímos estados no contínuo e quando é incluindo um estado no contínuo por paridade.

Como em nosso modelo o movimento relativo dos núcleos é descrito por uma trajetória de Rutherford, podemos partir da relação (2.77) para o cálculo do potencial de polarização em uma colisão frontal

$$U(w) = i\hbar \frac{v_\infty}{2r(w)} \left(\frac{d}{dw} \left[\ln a^{(+)}(w) \right] + \frac{d}{dw} \left[\ln a^{(-)}(w) \right] \right). \quad (3.62)$$

Para achar as amplitudes de probabilidade $a^{(-)}(w)$ e $a^{(+)}(w)$, primeiramente determinamos para cada w os coeficientes b_+ e b_- a partir das equações diferenciais acopladas (3.36), para o caso sem contínuo, e as eqs.(3.52) e (3.53) quando se inclui um estado no contínuo por paridade. Logo, procedemos a determinar quais seriam as amplitudes $a^{(-)}$ e $a^{(+)}$ em nosso caso particular.

Para determinar as amplitudes elásticas substituímos a eq.(3.27)

$$\begin{aligned} \varphi_b^{(+)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_2(x, t) + \chi_1(x, t) \right), \\ \varphi_b^{(-)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\chi_2(x, t) - \chi_1(x, t) \right), \end{aligned}$$

no estado proposto na seção 3.2.1, quando não tomamos em consideração o contínuo

$$\Psi(x, t) = b_+(t) e^{-iE_0 t/\hbar} \varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t) e^{-iE_0 t/\hbar} \varphi_b^{(-)}(x, t)$$

e no estado

$$\begin{aligned} \Psi(x, t) &= b_+(t) e^{-iE_0 t/\hbar} \varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t) e^{-iE_0 t/\hbar} \varphi_b^{(-)}(x, t) \\ &\quad + c_+(t) e^{-iE_c t/\hbar} \varphi_c^{(+)}(x) + c_-(t) e^{-iE_c t/\hbar} \varphi_c^{(-)}(x), \end{aligned}$$

quando incluímos um estado no contínuo por paridade (seção 3.2.2).

Como antes da colisão o nêutron estava no estado χ_1 podemos deduzir a partir dos coeficientes que o acompanham, que para os dois casos as amplitudes elásticas $a^{(-)}$ e $a^{(+)}$ podem-se determinar

por meio de

$$\begin{aligned} a^{(-)}(w) &= \frac{1}{2} \left(b_+(-w) - b_-(-w) \right), \\ a^{(+)}(w) &= \frac{1}{2} \left(b_+(w) - b_-(w) \right). \end{aligned} \quad (3.63)$$

A notação acima indica que o coeficiente $a^{(-)}$ foi calculado para valores de w que correspondem a distâncias entre o estágio inicial da colisão ($w \rightarrow -\infty$) até o ponto de retorno r_{ca} ($w = 0$). Enquanto o coeficiente $a^{(+)}$ foi calculado entre $w = 0$ e o final da colisão ($w \rightarrow \infty$).

Por outra parte, para analisar o papel que desempenham a parte real e imaginária do potencial de polarização sobre o fluxo do canal elástico vamos considerar a seguinte equação de Schrödinger independente do tempo para uma partícula de massa μ na presença de um potencial complexo U

$$\left(\frac{-\hbar^2}{2\mu} \vec{\nabla}^2 + U \right) \psi = E\psi, \quad (3.64)$$

com

$$U = -V - iW. \quad (3.65)$$

Então reescrevendo (3.64) temos

$$\left(\vec{\nabla}^2 + \frac{2m}{\hbar^2} (E + V + iW) \right) \psi = 0. \quad (3.66)$$

Se multiplicamos á anterior por ψ^* e subtraímos com a complexa conjugada multiplicada por ψ , achamos

$$\psi^* \vec{\nabla}^2 \psi - \psi \vec{\nabla}^2 \psi^* = \frac{-4i\mu W}{\hbar^2} \psi \psi^*. \quad (3.67)$$

Agora como a expressão quântica para a densidade de corrente é

$$\vec{j} = \frac{\hbar}{2i\mu} (\psi^* \vec{\nabla} \psi - \psi \vec{\nabla} \psi^*)$$

e fazendo uso de esta expressão e da eq.(3.67) concluímos

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{j} = -\frac{2}{\hbar} W \psi \psi^*.$$

Da equação acima podemos observar que para $W > 0$, a parte imaginária do potencial U esta associada com absorção de fluxo do canal incidente e $W < 0$ com ou ganho. Em nosso caso teríamos que a parte imaginária do potencial de polarização tem o efeito de absorver o ganhar fluxo do canal

elástico.

Tendo em mente a anterior dedução, consideremos as Figuras 3.14 e 3.15 as quais apresentam uma comparação entre a parte real e imaginária do potencial de polarização como função da separação entre os núcleos r quando o cálculo não inclui estados no contínuo (línea cheia) e quando têm um estado no contínuo por paridade (líneas tracejadas com Δ_k). Os cálculos foram realizados para uma energia de ligação do nêutron $-B$ de 1.3 MeV e a uma energia no centro de massa $E_{c.m.}$ de 16 MeV, próxima da barreira Coulombiana, que para este sistema é de 16.3 MeV.

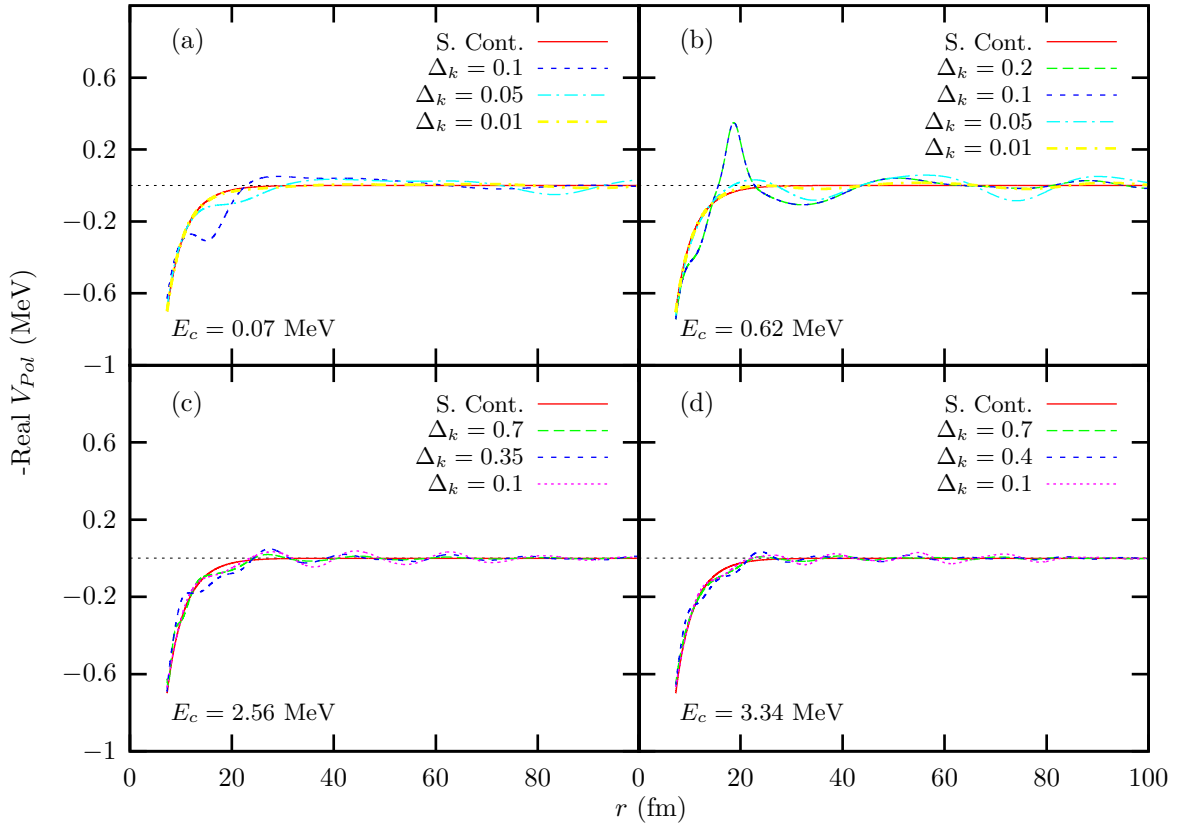


Figura 3.14: Comparação da parte real do potencial de polarização como função da separação dos poços r quando os cálculos não apresentam estados no contínuo (curva cheia) com os cálculos que têm um estado no contínuo por paridade (curvas tracejadas). As curvas que envolvem estados no contínuo mostram como varia o comportamento mantendo fixo o valor da energia relacionada ao centro do pacote E_c para diferentes valores da largura do pacote Δ_k . Para estas a distância máxima entre os centros dos poços $r_{m\acute{a}x}$ é igual a 4000 fm para os gráficos (a) e (b) e 150 fm para os (c) e (d). A energia centro de massa $E_{c.m.}$ é de 16 MeV e energia de separação do nêutron $-B$ é igual a 1.3 MeV. Em todos os casos o sistema é $^{27}\text{F} + ^{26}\text{F}$ numa colisão frontal seguindo uma trajetória Rutherford.

Ao observar a Figura 3.14 para a parte real do potencial vemos que a partir de r_{ca} , que em este caso é de 7.3 fm, o valor do potencial é negativo e cresce assintoticamente a zero. Além disso, vemos que as curvas que correspondem à inclusão de um estado no contínuo por paridade ficam

muito próximas do cálculo sem contínuo, com exceção da curva com Δ_k igual a 0.1 fm^{-1} do gráfico (b). Como este potencial em geral é atrativo, temos que sua contribuição é desprezível com relação ao potencial de Coulomb que para uma distância r de 8 fm é 14.6 MeV. Portanto vamos centrar nosso interesse na parte imaginária do potencial de polarização.

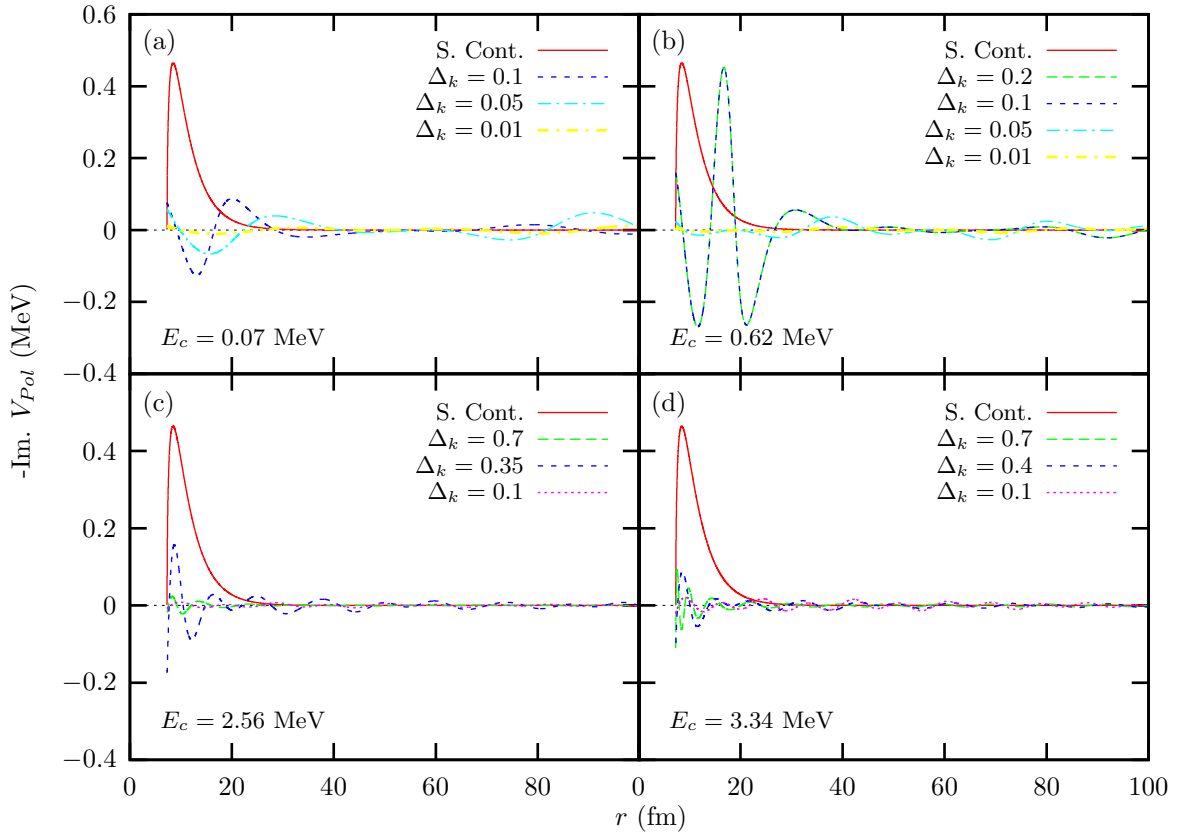


Figura 3.15: Descrição idêntica à Figura 3.14 para a parte imaginária do potencial de polarização.

Podemos relacionar a parte imaginária do potencial de polarização com a perda o ganho de fluxo de do canal elástico. Analisando este potencial podemos obter informação sobre a influência que têm os demais canais sobre este. Em nosso cálculo sem contínuo, ao não considera-lo temos que o potencial de polarização da conta diretamente do que acontece no canal de transferência. Destes cálculos concluímos que na região próxima do ponto de retorno ocorre uma diminuição do fluxo no canal elástico, a que pode ser relacionada com aumento da probabilidade do nêutron ser transferido. Por outro lado, observamos que as curvas que têm um estado no contínuo por paridade da Figura 3.15 oscilam alreodor de zero indicando perda e ganho de fluxo no canal elástico devido á presença de este. Estas oscilações são uma consequência do fato que temos um acoplamento forte entre os canais ligado e o único considerado no contínuo, que como mencionamos na subseção

anterior, faz que a quebra do sistema seja reversível. Esperamos que, quando este único canal no contínuo for dividido em um conjunto de canais, o fluxo de retorno ao canal de transferência diminua drasticamente, o que deve levar à eliminação destas oscilações.

Capítulo 4

Conclusões e perspectivas

Em esta tese apresentamos um modelo semiclássico esquemático para descrever a colisão entre dois núcleos, e em especial o processo de transferência de um nêutron em núcleos fracamente ligados. Para isto consideramos que o sistema que estudamos consiste do nêutron mais dois *cores* idênticos, e que esse nêutron se encontra inicialmente ligado a um desses *cores*. O modelo que desenvolvemos consiste em descrever quânticamente a dinâmica do nêutron enquanto que o movimento relativo dos núcleos é descrito por meio de uma trajetória clássica de Rutherford. Descrevemos a reação no caso da colisão ser frontal, o que leva o problema a ser unidimensional, facilitando grandemente os cálculos. Visando também simplificar esses cálculos, aproximamos o potencial de interação entre o nêutron e cada um dos *cores* como sendo uma delta de Dirac.

Comparamos os resultados do nosso modelo com os obtidos no artigo de Marta *et al.* [6], onde são investigados os efeitos da inclusão de estados no contínuo neste tipo de reações. Esses autores desenvolvem primeiramente um modelo de dois níveis, no qual o estado do nêutron é expandido em termos de orbitais adiabáticos associados a cada um dos poços, que eles consideram como quadrados. Estes orbitais são construídos a partir das auto-funções de estados ligados solução do Hamiltoniano total do sistema quando a dependência temporal é desprezada. Seguidamente resolvem numericamente a equação de Schrödinger para incluir automaticamente todos os estados do contínuo e proceder a avaliação de seu efeito (solução em Coordenadas.). Para tal fim fazem uma comparação entre as probabilidades elástica e de transferência assim como as correspondentes seções de choque. Se bem que eles encontram um efeito significativo pela inclusão do contínuo, entretanto a forma com que o mesmo é incluído não permite fazer um estudo detalhado desse efeito. Assim, não podemos deduzir, por exemplo, as energias do contínuo que mais influenciam o processo. O propósito deste trabalho foi o de iniciar um estudo que permita esclarecer esses aspectos.

No modelo proposto nesta tese, inicialmente é analisado o processo de transferência do nêutron sem levar em consideração os estados no contínuo. O estado do nêutron nesta situação, é expandido em termos de dois orbitais adiabáticos, representados por funções de onda com simetria par e ímpar, respectivamente. Estes estados são superposição de auto-funções do Hamiltoniano para o poço tipo delta de Dirac. Para achar a evolução temporal dos coeficientes da expansão, se introduze o estado proposto na equação de Schrödinger dependente do tempo, a partir da qual são obtidas equações diferenciais acopladas que envolvem estes coeficientes. A partir dos valores assintóticos para $t \rightarrow \infty$ são determinadas as probabilidades elástica e de transferência como função da energia da colisão calculada no sistema centro de massa. Os resultados obtidos coincidem com os encontrados com os de Marta *et al.* [6], para o caso sem inclusão do contínuo, o que serve como verificação do nosso programa de cálculo numérico. Como resultado novo, neste caso, determinamos, a partir dos valores dos coeficientes da expansão a cada instante de tempo, o potencial de polarização associado à perda ou ganho de fluxo no canal elástico que tem por origem o acoplamento com o canal de transferência.

A seguir realizamos o cálculo novamente, mas desta vez incluindo estados no contínuo. Os estados incluídos são um par e um ímpar, obtidos pela superposição de todos os estados do contínuo com essas paridades, em uma faixa de energia. Estas faixas de energia estão parametrizadas em termos do valor central, E_c , e a largura do pacote de onda, Δ_k , e estudamos que valores desses parâmetros dão uma descrição mais adequada do contínuo. Para isto comparamos as probabilidades elástica e de transferência obtidas com este modelo, com os cálculos de Marta *et al.* [6] no caso em que este é tratado exatamente. Realizamos um grande número de cálculos, variando o valor de E_c que variava entre valores próximos de zero até aproximadamente 5 MeV, e os valores de Δ_k desde valores muito pequenos até valores onde estes não geravam diferenças significantes com os resultados sem contínuo. Como subproduto do cálculo da evolução temporal dos coeficientes, calculamos também o potencial de polarização, que neste caso é associado ao acoplamento simultâneo com os canais de transferência e de *breakup*.

Das comparações realizadas podemos concluir que, independentemente dos valores da energia média e largura do pacote que representam o contínuo, em todos os casos os efeitos desse único estado no contínuo são muito pequenos, sinalizando que a descrição do contínuo a través de um único estado, por mais ampla que seja a faixa de energias nele incluídas, é definitivamente insuficiente. Interpretamos este resultado negativo em termos de analogias com outros cálculos de canais acoplados. De fato, nossos resultados são análogos à excitação coulombiana, onde, se o acoplamento é forte, é necessário incluir vários canais de excitação para uma adequada descrição do processo, enquanto, se o acoplamento for fraco, é possível descrevê-lo com apenas um canal de excitação.

Portanto consideramos que nossos resultados podem ser aplicados a núcleos com o nêutron não fracamente ligado, para o qual o acoplamento entre o estado fundamental do nêutron e o contínuo é fraco. Vemos também, seguindo com essa analogia, que o próximo passo a ser dado para entender precisamente o papel que têm as diferentes energias no contínuo, é realizar um cálculo análogo ao apresentado nesta tese, mas com mais estados no contínuo.

Os programas de cálculo desenvolvidos nesta tese são facilmente generalizados ao caso do contínuo ser representado por mais estados. Os elementos de matriz de acoplamento entre os estados ligados e os estados do contínuo são os mesmos calculados neste trabalho, enquanto que os de acoplamento entre os estados do contínuo são simples. Já foi desenvolvida a versão preliminar do programa que realiza estes cálculos, os que permitirão, determinar as posições e largura dos pacotes de onda que representam o contínuo de maneira a fazer os cálculos de maneira mais eficiente. Esperamos que esse procedimento de otimização da discretização do contínuo, realizado com este modelo semiclássico esquemático, seja de utilidade para os códigos de canais acoplados que são utilizados para descrever reações induzidas por núcleos fracamente ligados. A complexidade desses códigos faz que a otimização da descrição do contínuo tenha um papel essencial, sendo imprescindível para poder incluir um número adequado de canais.

Apêndice A

Equações diferenciais acopladas sem inclusão do contínuo

Consideramos que o problema duma colisão do tipo $(Z, N + 1) \rightarrow (Z, N)$ com o nêutron fracamente ligado ao núcleo $(Z, N + 1)$, pode ser estudado semiclássicamente fazendo uma simplificação do mesmo, ao descreve-lo numa dimensão. O nêutron está submetido a um potencial efetivo, V_{ef} , de dois poços delta cada um representando a interação deste com um *core* $(Z, N + 1)$. Nesta descrição a dinâmica do nêutron é descrita quânticamente e o movimento relativo entre os núcleos que interagem, $r(t)$, é dado por uma trajetória clássica de Rutherford, numa colisão frontal. Então, no sistema centro de massa temos que o Hamiltoniano associado a dinâmica do nêutron de massa m está dado por

$$H = T + V_{ef} \tag{A.1}$$

sendo

$$T = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2},$$

o operador energia cinética e

$$V_{ef} = V_1(x, t) + V_2(x, t),$$

o potencial efetivo no qual está submetido o nêutron, com $V_1(x, t)$ e $V_2(x, t)$ os potenciais delta que dependem intrínsecamente do tempo ao depender da separação entre os núcleos $r(t)$. Estes estão descritos por

$$V_1(x, t) = -\frac{V_0}{\kappa} \delta(x + r(t)/2),$$
$$V_2(x, t) = -\frac{V_0}{\kappa} \delta(x - r(t)/2),$$

com $V_0 = 2B$, $\kappa = \frac{\sqrt{2mB}}{\hbar}$ e $-B$ a energia de separação do nêutron.

Se não temos em consideração os possíveis estados que possa ter o nêutron no contínuo, podemos expandir o estado associado a este como

$$\Psi(x, t) = b_+(t)e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}}\varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t)e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}}\varphi_b^{(-)}(x, t), \quad (\text{A.2})$$

onde as fases $e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}}$ foram introduzidas por conveniência, enquanto as funções de onda de estados ligados $\varphi_b^{(+)}(x, t)$ e $\varphi_b^{(-)}(x, t)$ têm paridade par e ímpar respeito a inversão espacial respectivamente.

Estas estão definidas por

$$\begin{aligned} \varphi_b^{(+)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2(x, t) + \chi_1(x, t)), \\ \varphi_b^{(-)}(x, t) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\chi_2(x, t) - \chi_1(x, t)). \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Os orbitais adiabáticos $\chi_1(x, t)$ e $\chi_2(x, t)$ são auto-funções do Hamiltoniano associado a cada um dos poços quando a presença de um no influencia na do outro. Ou seja estes satisfazem as relações

$$H_i \chi_i(x, t) = -B \chi_i(x, t); \quad i = 1, 2, \quad (\text{A.4})$$

com

$$H_1 = T + V_1(x, t); \quad H_2 = T + V_2(x, t). \quad (\text{A.5})$$

Em conseqüência temos

$$\begin{aligned} \chi_1(x, t) &= \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x+r(t)/2|}, \\ \chi_2(x, t) &= \sqrt{\kappa} e^{-\kappa|x-r(t)/2|}. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Para obter a evolução temporal dos coeficientes b_+ e b_- achamos equações diferenciais que os relacionam. Para isto, substituímos o estado (A.2) na equação de Shrödinger com o qual achamos

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \left(\dot{b}_+ - i\frac{E_0}{\hbar}b_+ \right) \varphi_b^{(+)} + b_+ \dot{\varphi}_b^{(+)} + \left(\dot{b}_- - i\frac{E_0}{\hbar}b_- \right) \varphi_b^{(-)} + b_- \dot{\varphi}_b^{(-)} \right\} e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}} \\ = H \left\{ b_+(t)\varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t)\varphi_b^{(-)}(x, t) \right\} e^{-i\frac{E_0 t}{\hbar}}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Fazendo o produto escalar da equação acima com $\varphi_b^{*(+)}$ temos em notação de Dirac

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \left((b_+ - i\frac{E_0}{\hbar}b_+) \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle + b_+ \dot{r} \langle \varphi_b^{(+)} | \frac{\partial \varphi_b^{(+)}}{\partial r} \rangle \right) \right. \\ \left. + \left((b_- - i\frac{E_0}{\hbar}b_-) \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(-)} \rangle + b_- \dot{r} \langle \varphi_b^{(+)} | \frac{\partial \varphi_b^{(-)}}{\partial r} \rangle \right) \right. \\ \left. = b_+ \langle \varphi_b^{(+)} | \hat{H} | \varphi_b^{(+)} \rangle + b_- \langle \varphi_b^{(+)} | \hat{H} | \varphi_b^{(-)} \rangle \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

Por a simetria específica de cada um dos estados $\varphi_b^{(\pm)}$ e pela invariância do Hamiltoniano por reflexão espacial, obtemos que os elementos de matriz e produtos internos que misturam paridade se anulam. Além disso, como a derivada em r não muda a simetria da função de onda vemos que $\langle \varphi_b^{(+)} | \frac{\partial \varphi_b^{(-)}}{\partial r} \rangle$ também se anula. Portanto da equação (A.8) achamos

$$i\hbar \left\{ \left((b_+ - i\frac{E_0}{\hbar}b_+) \langle \varphi_b^{(+)} | \varphi_b^{(+)} \rangle + b_+ \dot{r} \langle \varphi_b^{(+)} | \frac{\partial \varphi_b^{(+)}}{\partial r} \rangle \right) \right\} = b_+ \langle \varphi_b^{(+)} | \hat{H} | \varphi_b^{(+)} \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Assim ao fazer o mesmo procedimento multiplicando (A.7) por $\varphi_b^{*(-)}$ e integrando, chegamos à equação diferencial

$$i\hbar \left\{ \left((b_- - i\frac{E_0}{\hbar}b_-) \langle \varphi_b^{(-)} | \varphi_b^{(-)} \rangle + b_- \dot{r} \langle \varphi_b^{(-)} | \frac{\partial \varphi_b^{(-)}}{\partial r} \rangle \right) \right\} = b_- \langle \varphi_b^{(-)} | \hat{H} | \varphi_b^{(-)} \rangle. \quad (\text{A.10})$$

Se observamos as relações (A.9) e (A.10) vemos que em estas os termos com simetria ímpar se desacoplam dos termos com simetria par. Por conseguinte podemos escreve-las

$$i\hbar \frac{db_{\pm}}{dt} \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = b_{\pm} \left(\langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle - E_0 \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle - i\hbar \dot{r} \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle \right). \quad (\text{A.11})$$

Como em nossos cálculos o movimento relativo dos núcleos $r(t)$ é descrito por uma trajetória de Rutherford, introduzimos então a parametrização em termos da variável w [8], para uma colisão frontal

$$t = \frac{a}{v_{\infty}} [\sinh w + w]; \quad r = a [\cosh w + 1], \quad (\text{A.12})$$

sendo $a = r_{ca}/2$ a metade da distância de aproximação máxima, r_{ca} , na trajetória de Rutherford e v_{∞} a velocidade assintótica do movimento projétil-alvo. Para escrever (A.11) em termos de w é

útil considerar as relações

$$\begin{aligned}\hbar \frac{d}{dt} &= \left(\hbar \frac{dw}{dt} \right) \frac{d}{dw} = \left(\frac{\varepsilon_0}{\cosh w + 1} \right) \frac{d}{dw} \\ \hbar \dot{r} &= \hbar \frac{dr/dw}{dt/dw} = \left(\frac{\varepsilon_0 \sinh w}{\cosh w + 1} \right) a,\end{aligned}\tag{A.13}$$

onde

$$\varepsilon_0 = \frac{\hbar v_\infty}{a}\tag{A.14}$$

é a escala de energia característica da colisão. Substituindo á eq.(A.13) na eq.(A.11) temos

$$\begin{aligned}i \mathcal{N}_{bb}^{(+)}(w) \dot{b}^{(+)}(w) &= \left[(\cosh w + 1) \frac{\mathcal{H}_{bb}^{(+)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(+)}(w)}{\varepsilon_0} - i \sinh w D_{bb}^{(+)}(w) \right] b_+(w), \\ i \mathcal{N}_{bb}^{(-)}(w) \dot{b}^{(-)}(w) &= \left[(\cosh w + 1) \frac{\mathcal{H}_{bb}^{(-)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(-)}(w)}{\varepsilon_0} - i \sinh w D_{bb}^{(-)}(w) \right] b_-(w).\end{aligned}\tag{A.15}$$

Nas expresões acima usamos as notações

$$\dot{b}^{(\pm)}(w) = \frac{db^{(\pm)}}{dw},\tag{A.16}$$

$$\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(w) = \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle,\tag{A.17}$$

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}(w) = \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle,\tag{A.18}$$

$$D_{bb}^{(\pm)}(w) = a \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle.\tag{A.19}$$

Onde o subíndice b significa que estas funções envolvem estados ligados.

Apêndice B

Equações diferenciais acopladas incluindo um estado no contínuo por paridade

Em nosso modelo, para incluir a possibilidade de que o nêutron possa ser liberado, consideramos seu estado quântico como descrito por a seguinte combinação de dois estados ligados $\varphi_b^{(+)}(x, t)$ e $\varphi_b^{(-)}(x, t)$, e dois estados no contínuo $\varphi_c^{(+)}(x)$ e $\varphi_c^{(-)}(x)$

$$\Psi(x, t) = b_+(t)e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}\varphi_b^{(+)}(x, t) + b_-(t)e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t}\varphi_b^{(-)}(x, t) + c_+(t)e^{-i\frac{E_c}{\hbar}t}\varphi_c^{(+)}(x) + c_-(t)e^{-i\frac{E_c}{\hbar}t}\varphi_c^{(-)}(x). \quad (\text{B.1})$$

Na equação acima as funções de onda $\varphi_c^{(+)}(x)$ e $\varphi_c^{(-)}(x)$ têm simetria para e ímpar respectivamente sob inversão de x por $-x$. Estas estão definidas por os pacotes de onda com centro k_0 e largura Δ_k

$$\varphi_c^{(+)}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \Gamma(k) \chi_k^{(+)}(x), \quad (\text{B.2})$$

$$\varphi_c^{(-)}(x) = \int_{-\infty}^{\infty} dk \Gamma(k) \chi_k^{(-)}(x), \quad (\text{B.3})$$

com as funções $\chi_k^{(+)}(x)$, $\chi_k^{(-)}(x)$ e $\Gamma(k)$ definidas como

$$\chi_k^{(+)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \cos kx; \quad \chi_k^{(-)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sin kx,$$

$$\Gamma(k) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{\Delta_k}} & k_0 - \frac{\Delta_k}{2} \leq k \leq k_0 + \frac{\Delta_k}{2}, \\ 0 & \text{em outro caso.} \end{cases}$$

Se consideramos as propriedades para a função delta de Dirac

$$\begin{aligned} \delta(k - k') &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \text{sen } kx \text{ sen } k'x, \\ \delta(k - k') &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \cos kx \cos k'x, \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

podemos demonstrar que estes estados são ortonormais. Agora se fazemos as notações $k_1 = k_0 - \frac{\Delta_k}{2}$ e $k_2 = k_0 + \frac{\Delta_k}{2}$, temos das relações (B.2) e (B.3)

$$\begin{aligned} \varphi_c^{(+)}(x) &= \frac{1}{\sqrt{\pi\Delta_k} x} \left(\text{sen } k_2x - \text{sen } k_1x \right), \\ \varphi_c^{(-)}(x) &= -\frac{1}{\sqrt{\pi\Delta_k} x} \left(\cos k_2x - \cos k_1x \right). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

Analogamente ao caso sem contínuo introduzimos o estado (B.1) na equação de Shrödinger dependente do tempo com o qual temos

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \left[\left(\dot{b}_+ - i\frac{E_0}{\hbar}b_+ \right) \varphi_b^{(+)} + b_+ \dot{\varphi}_b^{(+)} + \left(\dot{b}_- - i\frac{E_0}{\hbar}b_- \right) \varphi_b^{(-)} + b_- \dot{\varphi}_b^{(-)} \right] e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} \right. \\ \left. + \left[\left(\dot{c}_+ - i\frac{E_c}{\hbar}c_+ \right) \varphi_c^{(+)} + \left(\dot{c}_- - i\frac{E_c}{\hbar}c_- \right) \varphi_c^{(-)} \right] e^{-i\frac{E_c}{\hbar}t} \right\} \\ = H \left\{ \left(b_+ \varphi_b^{(+)} + b_- \varphi_b^{(-)} \right) e^{-i\frac{E_0}{\hbar}t} + \left(c_+ \varphi_c^{(+)} + c_- \varphi_c^{(-)} \right) e^{-i\frac{E_c}{\hbar}t} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

Tomando o produto escalar da equação acima com $e^{i\frac{E_0}{\hbar}t} \varphi_b^{*(\pm)}$ achamos

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \left(\dot{b}_\pm - i\frac{E_0}{\hbar}b_\pm \right) \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle + b_\pm \dot{r} \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle + \left[\left(\dot{c}_\pm - i\frac{E_c}{\hbar}c_\pm \right) \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle \right] e^{-i\Omega t} \right\} \\ = b_\pm \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle + c_\pm e^{-i\Omega t} \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

com

$$\Omega = \frac{E_c - E_0}{\hbar} = \frac{\Delta E}{\hbar}. \quad (\text{B.8})$$

Nas equações acima considerou-se que o Hamiltoniano conserva paridade e que os produtos internos entre estados de diferente paridade se anulam.

Igualmente multiplicando escalarmente á eq.(B.6) por $e^{i\frac{E_c}{\hbar}t}\varphi_c^{*(+)}$ temos

$$\begin{aligned} i\hbar \left\{ \left((\dot{b}_\pm - i\frac{E_0}{\hbar}b_\pm) \langle \varphi_c^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle + b_\pm \dot{r} \langle \varphi_c^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle \right) e^{i\Omega t} + (c_\pm - i\frac{E_c}{\hbar}c_\pm) \langle \varphi_c^{(\pm)} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle \right\} \\ = b_\pm e^{i\Omega t} \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle + c_\pm \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

Reagrupando termos e escrevendo as relações acima em termos das funções \mathcal{N} , \mathcal{H} e \mathcal{D} definidas no Apêndice A obtemos as relações

$$\begin{aligned} i\hbar \left[\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(t) \frac{db_\pm(t)}{dt} + e^{-i\Omega t} \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(t) \frac{dc_\pm(t)}{dt} \right] = \\ \left[\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}(t) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(t) - i\hbar \frac{\dot{r}}{a} \mathcal{D}_{bb}^{(\pm)}(t) \right] b_\pm(t) \\ + e^{-i\Omega t} \left[\mathcal{H}_{bc}^{(\pm)}(t) - E_c \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(t) \right] c_\pm(t), \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

e

$$\begin{aligned} i\hbar \left[e^{i\Omega t} \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(t) \frac{db_\pm(t)}{dt} + \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(t) \frac{dc_\pm(t)}{dt} \right] = \\ e^{i\Omega t} \left[\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)}(t) - E_0 \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(t) - i\hbar \frac{\dot{r}}{a} \mathcal{D}_{cb}^{(\pm)}(t) \right] b_\pm(t) \\ + \left[\mathcal{H}_{cc}^{(\pm)}(t) - E_c \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(t) \right] c_\pm(t). \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Se escrevemos este conjunto em termos da variável w que parametriza a trajetória hiperbólica de Rutherford, fazendo uso da eq.(A.13), podemos concluir que nosso conjunto de equações diferenciais quando incluem um único estado no contínuo por paridade está dado por

$$A_{bb}^{(\pm)} \dot{b}_\pm(w) + A_{bc}^{(\pm)} \dot{c}_\pm(w) = B_{bb}^{(\pm)} b_\pm(w) + B_{bc}^{(\pm)} c_\pm(w), \quad (\text{B.12})$$

$$A_{cb}^{(\pm)} \dot{b}_\pm(w) + A_{cc}^{(\pm)} \dot{c}_\pm(w) = B_{cb}^{(\pm)} b_\pm(w) + B_{cc}^{(\pm)} c_\pm(w), \quad (\text{B.13})$$

com

$$A_{bb}^{(\pm)} = \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(w), \quad A_{cc}^{(\pm)} = \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(w) = 1, \quad (\text{B.14})$$

$$A_{bc}^{(\pm)} = e^{-i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(w), \quad A_{cb}^{(\pm)} = e^{i\frac{\Delta E}{\varepsilon_0}\tau(w)} \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(w), \quad (\text{B.15})$$

$$B_{bb}^{(\pm)} = -i (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right) - \sinh w \mathcal{D}_{bb}^{(\pm)}(w), \quad (\text{B.16})$$

$$B_{bc}^{(\pm)} = -i e^{-i \frac{\Delta E}{\varepsilon_0} \tau(w)} (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{bc}^{(\pm)}(w) - E_c \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right), \quad (\text{B.17})$$

$$B_{cb}^{(\pm)} = -i e^{i \frac{\Delta E}{\varepsilon_0} \tau(w)} (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)}(w) - E_0 \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right), \quad (\text{B.18})$$

$$- e^{i \frac{\Delta E}{\varepsilon_0} \tau(w)} \sinh w \mathcal{D}_{cb}^{(\pm)}(w),$$

$$B_{cc}^{(\pm)} = -i (\cosh w + 1) \left(\frac{\mathcal{H}_{cc}^{(\pm)}(w) - E_c \mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}(w)}{\varepsilon_0} \right). \quad (\text{B.19})$$

B.1 Produtos internos

Nosso interesse agora é achar os produtos internos que definem as funções \mathcal{N} e \mathcal{D} descritas nas equações diferenciais sem contínuo e com um estado no contínuo por paridade, segundo nosso modelo. Começamos por achar as funções $\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}$ e $\mathcal{D}_{bb}^{(\pm)}$, definidas nas eqs.(A.17) e (A.19) respectivamente, que envolvem somente estados ligados. Levemos em consideração as definições dadas em (A.3) das funções $\varphi_b^{(\pm)}(x, t)$ em $\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}$. Isto é

$$\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)} = \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{2} \left(\langle \chi_2 | \pm \langle \chi_1 | \right) \left(| \chi_2 \rangle \pm | \chi_1 \rangle \right) \quad (\text{B.20})$$

$$= \frac{1}{2} \left(\langle \chi_2 | \chi_2 \rangle + \langle \chi_1 | \chi_1 \rangle \pm 2 \langle \chi_2 | \chi_1 \rangle \right) \quad (\text{B.21})$$

e se consideramos que as funções χ_1 e χ_2 estão normalizadas obtemos

$$\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)} = 1 \pm \langle \chi_2 | \chi_1 \rangle. \quad (\text{B.22})$$

Agora fazendo uso da eq.(A.6) que define as funções χ_1 e χ_2 , podemos escrever o produto interior $\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle$ como

$$\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle = \kappa \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\kappa|x-r/2|} e^{-\kappa|x+r/2|},$$

a qual é equivalente a

$$\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle = \int_{-\infty}^{-r/2} dx e^{\kappa(x-r/2)} e^{\kappa(x+r/2)} + \int_{-r/2}^{r/2} dx e^{\kappa(x-r/2)} e^{-\kappa(x+r/2)} + \int_{r/2}^{\infty} dx e^{-\kappa(x-r/2)} e^{-\kappa(x+r/2)},$$

onde ao integrar e agrupar termos achamos

$$\langle \chi_2 | \chi_1 \rangle = e^{-\kappa r} (1 + \kappa r). \quad (\text{B.23})$$

Se substituimos esta expressão na eq.(B.22) obtemos que a nossa função $\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}$ está dada por

$$\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)} = 1 \pm e^{-\kappa r} (1 + \kappa r), \quad (\text{B.24})$$

com o qual vemos que esta é igual a 1 somente para $r \rightarrow \infty$.

Por outra parte, para achar $D_{bb}^{(\pm)}$ temos em consideração que as funções $\varphi_b^{(\pm)}$ são reais e portanto se satisfaz a seguinte propriedade

$$\frac{\partial}{\partial r} \langle \varphi_b^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = 2 \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle,$$

logo das equações (B.24), (A.17) e (A.19) achamos

$$D_{bb}^{(\pm)} = a \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle = \mp a \frac{\kappa^2 r e^{-\kappa r}}{2}. \quad (\text{B.25})$$

Agora consideremos as funções que relacionam estados do contínuo, $\mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}$, $\mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}$, e $D_{cb}^{(\pm)}$, começanco com a função $\mathcal{N}_{cc}^{(\pm)}$ que define o produto interno entre funções do contínuo da mesma paridade. Este é igual à unidade, já que estas funções estão normalizadas. Ou seja

$$\mathcal{N}_{cc}^{(\pm)} = \langle \varphi_c^{(\pm)} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle = 1. \quad (\text{B.26})$$

Seguidamente, calculemos as funções $\mathcal{N}_{cb}^{(\pm)}$ que envolvem os produtos internos entre os estados do contínuo e os ligados, notando que estas funções satisfazem

$$\mathcal{N}_{cb}^{(\pm)} = \mathcal{N}_{bc}^{(\pm)},$$

pois envolvem produtos internos de funções reais. Começemos então introduzindo $\varphi_c^{(\pm)}$ no produto interior. Isto é

$$\mathcal{N}_{cb}^{(\pm)} = \langle \varphi_c^{(\pm)} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \varphi_c^{(\pm)} | \chi_2 \rangle \pm \langle \varphi_c^{(\pm)} | \chi_1 \rangle \right), \quad (\text{B.27})$$

a qual, ao considerar a definição das funções χ_1 e χ_2 pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)} = \sqrt{\frac{\kappa}{2}} \left[\int_{-\infty}^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{\kappa(x-r/2)} + \int_{r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa(x-r/2)} \right. \\ \left. \pm \left(\int_{-\infty}^{-r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{\kappa(x+r/2)} + \int_{-r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa(x+r/2)} \right) \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Então ao trocar x por $-x$ na primeira e terceira integral na eq.(B.28) e agrupando termos obtemos

$$\mathcal{N}_{cb}^{(\pm)} = \sqrt{2\kappa} \left(\pm e^{-\kappa r/2} \int_{-r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} + e^{\kappa r/2} \int_{r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right). \quad (\text{B.29})$$

Se levamos em consideração na equação acima que a primeira integral pode ser escrita como

$$\int_{-r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} = \int_{-r/2}^0 dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} + \int_0^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x}$$

e a segunda

$$\int_{r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} = \int_0^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} - \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x},$$

vemos que

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{cb}^{(+)} = \sqrt{2\kappa} \left(e^{-\kappa r/2} \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{\kappa x} - e^{\kappa r/2} \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right. \\ \left. + 2 \cosh \kappa r/2 \int_0^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right) \end{aligned} \quad (\text{B.30})$$

e

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{cb}^{(-)} = -\sqrt{2\kappa} \left(-e^{-\kappa r/2} \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(-)}(x) e^{\kappa x} - e^{\kappa r/2} \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right. \\ \left. - 2 \sinh \kappa r/2 \int_0^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Agora se substituimos a definição (B.5) para a função de onda simétrica do contínuo temos com a mudança de variável $y = \frac{2}{x}r$

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{cb}^{(+)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\pi \Delta_k}} \left[e^{-\alpha} \left(I_s(\alpha, \beta) - I_s(\alpha, \delta) \right) - e^{\alpha} \left(I_s(-\alpha, \beta) - I_s(-\alpha, \delta) \right) \right. \\ \left. + 2 \cosh \alpha \int_0^{\infty} \frac{dy}{y} \left(\sin \beta y - \sin \delta y \right) e^{-\alpha y} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.32})$$

sendo I_s as integrais definidas em (C.6) e

$$\alpha = \kappa r/2; \quad \beta = k_2 r/2; \quad \delta = k_1 r/2. \quad (\text{B.33})$$

Então se consideramos a solução das integrais descritas na eq.(B.32) cujas soluções estão no

apêndice C, com a notação

$$z_1 = \alpha + i\beta; \quad z_2 = \alpha - i\beta; \quad y_1 = \alpha + i\delta; \quad y_2 = \alpha - i\delta, \quad (\text{B.34})$$

achamos

$$\mathcal{N}_{cb}^{(+)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\pi\Delta_k}} \left\{ e^{-\alpha} \left(\Im E_1(-z_2) - \Im E_1(-y_2) \right) - e^{\alpha} \left(\Im E_1(z_1) - \Im E_1(y_1) \right) \right\}, \quad (\text{B.35})$$

onde $\Im E_1$ denota a parte imaginária da função exponencial integral, E_1 , de argumento complexo, cuja definição e a suas propriedades estão no apêndice C.

Fazendo o mesmo procedimento podemos achar a função $\mathcal{N}_{cb}^{(-)}$. Então se introduzimos $\varphi_c^{(-)}$ (eq.(B.5)) na eq.(B.31) e fazemos a mesma mudança de variável $y = \frac{2}{x}r$ temos

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{cb}^{(-)} = -\sqrt{\frac{2\kappa}{\pi\Delta_k}} & \left(e^{-\alpha} \int_0^1 \frac{dy}{y} (\cos \beta y - \cos \delta y) e^{\alpha y} - e^{\alpha} \int_0^1 \frac{dy}{y} (\cos \beta y - \cos \delta y) e^{-\alpha y} \right. \\ & \left. + 2 \sinh \alpha \int_0^{\infty} \frac{dy}{y} (\cos \beta y - \cos \delta y) e^{-\alpha y} \right), \end{aligned}$$

que pode ser escrita em termos das funções integrais I_c definidas na eq.(C.5)

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{cb}^{(-)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\pi\Delta_k}} & \left\{ e^{-\alpha} \left(I_c(\alpha, \beta) - I_c(\alpha, \delta) \right) - e^{\alpha} \left(I_c(-\alpha, \beta) - I_c(-\alpha, \delta) \right) \right. \\ & \left. + 2 \sinh \alpha \left(\int_0^{\infty} \frac{dy}{y} (1 - \cos \beta y) e^{-\alpha y} - \int_0^{\infty} \frac{dy}{y} (1 - \cos \delta y) e^{-\alpha y} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

Então se levamos em consideração as integrais descritas em (C.5) e a eq.(C.7) achamos

$$\mathcal{N}_{cb}^{(-)} = \sqrt{\frac{2\kappa}{\pi\Delta_k}} \left\{ e^{-\alpha} \left(\Re E_1(-z_2) - \Re E_1(-y_2) \right) - e^{\alpha} \left(\Re E_1(z_1) - \Re E_1(y_1) \right) \right\}, \quad (\text{B.37})$$

sendo $\Re E_1$ a parte real da exponencial integral E_1 definida no Apêndice C.

Por último determinemos as funções $D_{cb}^{(\pm)}$, ressaltando primeiramente que

$$D_{bc}^{(\pm)} = a \langle \varphi_b^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_c^{(\pm)}}{\partial r} \rangle = 0,$$

já que a funções do contínuo não dependem de $r(t)$. E como vamos demonstrar que as funções $D_{cb}^{(\pm)}$ são diferentes de zero, vemos que

$$D_{cb}^{(\pm)} \neq D_{bc}^{(\pm)}.$$

Para achar as funções $D_{cb}^{(\pm)}$ partamos das relações (A.3) e (A.19), com o qual temos

$$D_{cb}^{(+)} = a \langle \varphi_c^{(\pm)} | \frac{\partial \varphi_b^{(\pm)}}{\partial r} \rangle = \frac{a}{\sqrt{2}} \left(\langle \varphi_c^{(\pm)} | \frac{\partial \chi_2}{\partial r} \rangle \pm \langle \varphi_c^{(\pm)} | \frac{\partial \chi_1}{\partial r} \rangle \right).$$

Logo substituindo as funções χ_1 e χ_2 temos

$$D_{cb}^{(\pm)} = a \sqrt{\frac{\kappa}{2}} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dr \varphi_c^{(+)}(x) \frac{\partial}{\partial r} \left(e^{\kappa|x-r(t)/2|} \right) \pm \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) \frac{\partial}{\partial r} \left(e^{\kappa|x+r(t)/2|} \right) \right]$$

e fazendo as derivadas da equação acima resulta

$$D_{cb}^{(+)} = \frac{a\kappa}{2} \sqrt{\frac{\kappa}{2}} \left(-e^{-\kappa r/2} \int_{-\infty}^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{\kappa x} + e^{\kappa r/2} \int_{r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right. \\ \left. + e^{\kappa r/2} \int_{-\infty}^{-r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{\kappa x} - e^{-\kappa r/2} \int_{-r/2}^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right).$$

Com um procedimento análogo ao usado para obter as equações (B.29) e (B.30) achamos

$$D_{cb}^{(+)} = a \sqrt{\frac{\kappa^3}{2}} \left(-e^{-\kappa r/2} \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{\kappa x} - e^{\kappa r/2} \int_0^{r/2} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right. \\ \left. + 2 \sinh \kappa r/2 \int_0^{\infty} dx \varphi_c^{(+)}(x) e^{-\kappa x} \right). \quad (\text{B.38})$$

Portanto, se consideramos a função de onda do contínuo simétrica dada na eq.(B.5), com a mudança de variável $y = \frac{2}{x}r$ e as notações dadas nas eqs.(B.33) e (B.34) chegamos a que a nossa função $D_{cb}^{(+)}$ está dada por

$$D_{cb}^{(+)} = -a \sqrt{\frac{\kappa^3}{2\pi\Delta_k}} \left\{ e^{-\alpha} \left(\Im E_1(-z_2) - \Im E_1(-y_2) \right) + e^{\alpha} \left(\Im E_1(z_1) - \Im E_1(y_1) \right) \right\}, \quad (\text{B.39})$$

enquanto para $D_{cb}^{(-)}$ achamos

$$D_{cb}^{(-)} = -a \sqrt{\frac{\kappa^3}{2\pi\Delta_k}} \left\{ e^{-\alpha} \left(\Re E_1(-z_2) - \Re E_1(-y_2) \right) + e^{\alpha} \left(\Re E_1(z_1) - \Re E_1(y_1) \right) \right\}. \quad (\text{B.40})$$

Onde levamos em conta as integrais descritas nas eqs.(C.5), (C.6), (C.7) e (C.8).

B.2 Elementos de matriz

Determinemos em esta seção as funções \mathcal{H} associadas aos elementos de matriz do Hamiltoniano H considerado na equação (A.1), comecemos com

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)} = \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_b^{(\pm)} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \chi_2 \rangle \pm \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{H} | \chi_1 \rangle \right). \quad (\text{B.41})$$

Assim, se levamos em conta que o Hamiltoniano pode ser escrito como

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{V}_2 \quad \text{ou} \quad \hat{H} = \hat{H}_2 + \hat{V}_1, \quad (\text{B.42})$$

com \hat{H}_1 e \hat{H}_2 definidos em (A.5) temos a seguinte expressão

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{V}_1 + \hat{H}_2 | \chi_2 \rangle \pm \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{V}_2 + \hat{H}_1 | \chi_1 \rangle \right).$$

Agora fazendo uso das expressões de auto-valores definidas na eq.(A.4) vemos que

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-B \langle \varphi_b^{(\pm)} | \chi_2 \rangle + \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle \mp B \langle \varphi_b^{(\pm)} | \chi_1 \rangle \pm \langle \varphi_b^{(\pm)} | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle \right)$$

e se consideramos (A.3) podemos escrever à equação acima como

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)} = -B \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)} + \frac{1}{2} \left(\langle \chi_2 | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle \pm \langle \chi_1 | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle \pm \langle \chi_2 | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle + \langle \chi_1 | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle \right). \quad (\text{B.43})$$

Como $V_1 = -\frac{V_0}{\kappa} \delta(x + r/2)$ e $V_2 = -\frac{V_0}{\kappa} \delta(x - r/2)$ temos o seguinte

$$\langle \chi_2 | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = \langle \chi_1 | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle = -V_0 e^{-2\kappa r}, \quad (\text{B.44})$$

enquanto

$$\langle \chi_1 | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = \langle \chi_2 | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle = -V_0 e^{-\kappa r}. \quad (\text{B.45})$$

Substituindo (B.44) e (B.45) em (B.43) obtemos que as funções $\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)}$ estão descritas por

$$\mathcal{H}_{bb}^{(\pm)} = -B \mathcal{N}_{bb}^{(\pm)} - V_0 e^{-\kappa r} \left(e^{-\kappa r} \pm 1 \right), \quad (\text{B.46})$$

com $\mathcal{N}_{bb}^{(\pm)}$ dadas por a eq.(B.24).

Do mesmo modo, para determinar a função $\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)}$ podemos levar em consideração à eq.(B.42).

Então considerando (A.5) e escrevendo $\varphi_b^{(\pm)}$ em termos de χ_1 e χ_2 temos

$$\mathcal{H}_{cb}^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_1 + \hat{H}_2 | \chi_2 \rangle \pm \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_2 + \hat{H}_1 | \chi_1 \rangle \right)$$

e fazendo uso da equação de autovalores (A.4) na expressão acima achamos

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{cb}^{(\pm)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(-B \langle \varphi_c^{(\pm)} | \chi_2 \rangle + \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle \mp B \langle \varphi_c^{(\pm)} | \chi_1 \rangle \pm \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle \right), \\ &= -B \mathcal{N}_{cb}^{(\pm)} + \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle \pm \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle \right). \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

Substituindo a função de onda simétrica do contínuo dada em (B.5) temos para $\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle$ o seguinte

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = -\frac{V_0}{\sqrt{\pi \Delta_k \kappa}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x} e^{-\kappa|x-r(t)/2|} \left(\text{sen } k_2 x - \text{sen } k_1 x \right) \delta(x+r/2).$$

Então ao integrar vemos que

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = -\frac{2V_0}{\sqrt{\pi \kappa \Delta_k}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \left(\text{sen } k_2 r/2 - \text{sen } k_1 r/2 \right), \quad (\text{B.48})$$

analogamente podemos demonstrar

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = \langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle.$$

Portanto concluímos que a função $\mathcal{H}_{cb}^{(+)}$ que define o acople dos estados simétricos ligado e do contínuo é

$$\mathcal{H}_{cb}^{(+)} = -B \mathcal{N}_{cb}^{(+)} - V_0 \sqrt{\frac{8}{\pi \Delta_k \kappa}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \left(\text{sen } k_2 r/2 - \text{sen } k_1 r/2 \right), \quad (\text{B.49})$$

com $\mathcal{N}_{cb}^{(+)}$ dada por a eq.(B.35).

Por outro lado, é possível demonstrar

$$\langle \varphi_c^{(-)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = -\langle \varphi_c^{(-)} | \hat{V}_2 | \chi_1 \rangle$$

e

$$\langle \varphi_c^{(-)} | \hat{V}_1 | \chi_2 \rangle = -\frac{2V_0}{\sqrt{\pi \kappa \Delta_k}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \left(\cos k_2 r/2 - \cos k_1 r/2 \right),$$

com o qual temos da eq.(B.43)

$$\mathcal{H}_{cb}^{(-)} = -B\mathcal{N}_{cb}^{(-)} - V_0 \sqrt{\frac{8}{\pi\kappa\Delta_k}} \frac{e^{-\kappa r}}{r} \left(\cos k_2 r/2 - \cos k_1 r/2 \right). \quad (\text{B.50})$$

Por outro lado, consideremos agora os elementos matriciais do Hamiltoniano que somente envolvem estados no contínuo. Se começamos com

$$\mathcal{H}_{cc}^{(\pm)} = \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{H} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle = \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{T} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle + \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_1 | \varphi_c^{(\pm)} \rangle + \langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{V}_2 | \varphi_c^{(\pm)} \rangle, \quad (\text{B.51})$$

podemos então escrever o primeiro termo da equação acima como

$$\langle \varphi_c^{(\pm)} | \hat{T} | \varphi_c^{(\pm)} \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{-\infty}^{\infty} dx \varphi_c^{(\pm)}(x) \frac{\partial^2 \varphi_c^{(\pm)}(x)}{\partial x^2}.$$

Tendo em conta a definição da função $\varphi_c^{(+)}(x)$ dada em (B.5)

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{T} | \varphi_c^{(+)} \rangle = \frac{\hbar^2}{2m\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \Gamma(k') \int_{-\infty}^{\infty} dk k^2 \Gamma(k) \int_{-\infty}^{\infty} dx \cos k' x \cos kx,$$

considerando a expansão da delta de Dirac descrita em (B.4) e a definição de $\Gamma(k)$ chegamos a

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{T} | \varphi_c^{(+)} \rangle = \frac{\hbar^2}{6m\Delta_k} (k_2^3 - k_1^3), \quad (\text{B.52})$$

com $k_2 = k_0 + \frac{\Delta_k}{2}$ e $k_1 = k_0 - \frac{\Delta_k}{2}$ notados anteriormente. Então fazendo um mesmo procedimento é possível mostrar

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{T} | \varphi_c^{(+)} \rangle = \langle \varphi_c^{(-)} | \hat{T} | \varphi_c^{(-)} \rangle.$$

Os elementos de matriz dos operadores \hat{V}_1 e \hat{V}_2 se podem obter substituindo a definição (B.5) da função de onda simétrica do contínuo, com o qual temos

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \varphi_c^{(+)} \rangle = -\frac{V_0}{\pi\Delta_k\kappa} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2} \left(\sin k_2 x - \sin k_1 x \right) \left(\sin k_2 x - \sin k_1 x \right) \delta(x + r/2),$$

então multiplicando termos e utilizando a propriedade $\sin a \sin b = \frac{\cos(a-b) - \cos(a+b)}{2}$, temos

$$\begin{aligned} \langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \varphi_c^{(+)} \rangle = & -\frac{4V_0}{\pi\kappa\Delta_k r^2} \left\{ 1 - \cos(k_2 - k_1) \frac{r}{2} + \cos(k_2 + k_1) \frac{r}{2} \right. \\ & \left. - \frac{1}{2} \cos k_2 r - \frac{1}{2} \cos k_1 r \right\}. \end{aligned} \quad (\text{B.53})$$

com

$$\langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_1 | \varphi_c^{(+)} \rangle = \langle \varphi_c^{(+)} | \hat{V}_2 | \varphi_c^{(+)} \rangle.$$

Fazendo uso das expressões (B.52) e (B.53) em (B.51) podemos concluir o seguinte

$$\mathcal{H}_{cc}^{(+)} = \frac{\hbar^2}{6m\Delta_k}(k_2^3 - k_1^3) - \frac{8V_0}{\pi\kappa\Delta_k r^2} \left\{ 1 - \cos(k_2 - k_1)\frac{r}{2} + \cos(k_2 + k_1)\frac{r}{2} - \frac{1}{2} \cos k_2 r - \frac{1}{2} \cos k_1 r \right\}. \quad (\text{B.54})$$

Da mesma forma achamos que a função $\mathcal{H}_{cc}^{(-)}$ está dada por

$$\mathcal{H}_{cc}^{(-)} = \frac{\hbar^2}{6m\Delta_k}(k_2^3 - k_1^3) - \frac{8V_0}{\pi\kappa\Delta_k r^2} \left\{ 1 - \cos(k_2 + k_1)\frac{r}{2} + \cos(k_2 - k_1)\frac{r}{2} + \frac{1}{2} \cos k_2 r + \frac{1}{2} \cos k_1 r \right\}. \quad (\text{B.55})$$

Apêndice C

Expressões matemáticas:

Exponencial integral e funções relacionadas

A função exponencial integral de um número complexo está definida por [11]:

$$E_1(z) = \int_z^\infty dt \frac{e^{-t}}{t} = \Re E_1(z) + i\Im E_1(z) \quad (|\arg z| < \pi), \quad (\text{C.1})$$

com $\Re E_1(z)$ denotando a parte real da exponencial integral $E_1(z)$ e $\Im E_1(z)$ sua parte imaginária. O argumento z é o número complexo $z = x + iy$, com x e y suas partes real e imaginária respectivamente. A função exponencial integral pode ser escrita em termos da expansão em series

$$E_1(z) = -\gamma - \ln z - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n z^n}{nn!}, \quad (\text{C.2})$$

com $\gamma = 0.5772156649 \dots$ a constante de Euler. Se o argumento é real existem as seguintes definições da função exponencial integral [21]

$$\begin{aligned} Ei(x) &= -\oint_{-x}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} = \oint_{-\infty}^x dt \frac{e^{-t}}{t}, \\ -Ei(-x) &= \int_{-x}^{\infty} dt \frac{e^{-t}}{t} \quad x > 0, \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

onde \oint denota o valor principal de Cauchy. Então para $y > 0$ temos

$$\begin{aligned} E_1(y) &= -Ei(-y), \\ -E_1(-y) &= Ei(-y) + i\pi. \end{aligned} \tag{C.4}$$

Em termos das anteriores funções E_1 e Ei , podemos encontrar as seguintes integrais úteis que envolvem $\cos bt$

$$\begin{aligned} I_c(a, b) &= \int_0^1 \frac{dt}{t} (1 - \cos bt) e^{at} = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{b^2}{a^2} \right) + Ei(a) + \Re E_1(-a + ib) \quad (a > 0, b \in \Re), \\ I_c(-a, b) &= \int_0^1 \frac{dt}{t} (1 - \cos bt) e^{-at} = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{b^2}{a^2} \right) - E_1(a) + \Re E_1(a + ib) \quad (a > 0, b \in \Re), \end{aligned} \tag{C.5}$$

enquanto as que têm $\sin bt$ estão definidas por

$$\begin{aligned} I_s(a, b) &= \int_0^1 \frac{dt}{t} \sin bt e^{at} = \pi - \arctan \left(\frac{b}{a} \right) + \Im E_1(-a + ib) \quad (a > 0, b > 0), \\ I_s(-a, b) &= \int_0^1 \frac{dt}{t} \sin bt e^{-at} = \arctan \left(\frac{b}{a} \right) + \Im E_1(a + ib) \quad (a > 0, b \in \Re). \end{aligned} \tag{C.6}$$

Por outro lado, outras integrais úteis consideradas no Apêndice B são

$$\int_0^\infty \frac{dt}{t} (1 - \cos bt) e^{-at} = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{b^2}{a^2} \right) \tag{C.7}$$

e

$$\int_0^\infty \frac{dt}{t} \sin bt e^{-at} = \tan^{-1} \left(\frac{a}{b} \right). \tag{C.8}$$

Apêndice D

Código computacional implementado

```
C=====
C   program wpacket
C=====
C   This version calculates the elastic and transfer probabilities taking four states with the
C   interacting potential as two identical delta potentials. The calculations are made in the
C   center of mass system. The classical trajectory is a Rutherford one. It separates the
C   center and the width of the wave packet and includes polarization potential
C   calculation.
C=====
      implicit real*8 (a-h,o-z)
      double precision k0,k1,k2,k3,k4
      complex*16 ci,amps,ampa,dercs,derca,derlogc
      complex*16 arg,c,bamps,bampa,derbs,derba,derlogb
      complex*16 zz1,zz2,zce1,zce2
      complex*16 yy1,yy2,yce1,yce2
      complex*16 pzce2,pyce2
      complex*16 cel,vpolc,vpolb
      include 'wpacket05.dim'
      dimension r(maxr),alphas(maxp,maxp,maxr),betas(maxp,maxp,maxr)
      dimension alphaa(maxp,maxp,maxr),betaa(maxp,maxp,maxr)
      dimension hams(maxp,maxp,maxr),hama(maxp,maxp,maxr)
      dimension amps(maxp),ampa(maxp),dercs(maxp),derca(maxp)
      dimension coef(maxp,maxp),e(maxp),c(4)
      dimension coef1(maxp,maxp),coef2(maxp,maxp),acop(4,4),en(4)
      dimension bamps(1),bampa(1),derbs(maxp),derba(maxp)
      dimension derlogc(-ntt:ntt),derlogb(-ntt:ntt)
      dimension cel(nt21),rw(nt21)
      common/values/ci,eps0,pi
      common /rmesh/r
      common /nmesh/nrmax,npar
      common /rrr/rr
      common/deriv/rrdot
      common/tauw/tau
```

```

common/parity/isa,icont
common/eners/alphas,betas,hams
common/enera/alphaa,betaa,hama
common/energy/e
external cdot
C
open (5,file='wpacket05.in',status='old')
open (7,file='wpacket05.dat',status='unknown')
open (8,file='wpbup05.dat',status='unknown')
open (9,file='ppotc.dat',status='unknown')
open (10,file='ppotb.dat',status='unknown')
open (11,file='wpacket05.out',status='unknown')
C=====
C  INPUT DATA
C=====
C  Mass number of the transferred particle
read(5,*) ap
C=====
C  Atomic and mass numbers of the core-nuclei (same for projectil
C  and target)
read(5,*) z1,a1
C=====
C  Binding energy of the bound particle (MeV)
read(5,*) bind
C=====
C  Collision energy mesh parameters (MeV)
read(5,*) ecm1,ecm2,decm
C=====
C  Wave packet parameters:
C  Width = delta (fm-1)
C  center of the wave packet = k0 (fm-1) (It must be greater than
C  delta)
read(5,*) delta
read(5,*) k0
C=====
C  Number of equations by parity
npar = 2
read(5,*) delta
read(5,*) k0
C=====
C  Number of equations by parity
npar = 2
C=====
C  Nucleon mass*c**2 (MeV)
xmn = 931.5d0
C=====
C  Transferred particle mass*c**2 (MeV)
xmass = xmn*ap
C=====
C  Square electron charge (MeV*fm)
esq = 1.4398d0
C=====
C  hbar*c (MeV)
hc = 197.3d0
C=====
C  Constant values

```

```

a2 = a1
z2 = z1
ci = cmplx(0.d0,1.d0)
pi = acos(-1.d0)
imax = (ecm2-ecm1)/decm
C=====
C   Reduced mass of projectile-target system *c**2 (MeV)
xmu = xmass*a1*a2/(a1+a2)
C=====
C   Speed of light (fm/s)
vlight = 3.0d23
C=====
C   Bound state energy
C=====
eb = -bind
C=====
C   Bound state wave vector
C=====
q = sqrt(-2.*xmass*eb)/hc
C=====
C   Depth associated to a delta potential (MeV)
C=====
v0 = 2.*bind/q
C=====
C   Maximum and minimum of the histogram wave packet
C=====
k1 = k0-delta/2.
k2 = k0+delta/2.
k3 = k1
k4 = k2
e0 = (hc*k0)**2./(2.*xmass)
if (k0.lt.delta/2.) then
write (*,*) 'k0 is less than delta'
stop
endif
C=====
C   Maximal and minimal distances between the center of the wells (fm)
rmax = 2500.d0
rmin = 6.d0
C=====
C   Output file
write(11,*) 'Wave packet parameters:'
write(11,*) 'Width= ', delta
write(11,*) 'Center= ', k0
write(11,*) '*****'
write(11,*) 'Maximal distance between the centers =',rmax
write(11,*) 'Energy of the center of the wave packet =',e0
C=====
C   Equale space r evaluation
C=====
dr = 1.d0
nrmax = (rmax-rmin)/dr+3
C
do ir = 1,nrmax
r(ir) = rmin+dr*(ir-1)
end do

```

```

C
  do 700 ir=1,nrmax
    rr = r(ir)
    x1 = -rr/2.
    x2 = rr/2.
C=====
C   Symmetrical inner products
C=====
    afa = q*rr/2.
    bta = k2*rr/2.
    dta = k1*rr/2.
    zz1 = afa+ci*bta
    zz2 = afa-ci*bta
    yy1 = afa+ci*dta
    yy2 = afa-ci*dta
    ct1 = sqrt(2.*q/(pi*delta))
    ct2 = sqrt(q**3./(2.*pi*delta))
C
    call e1z(zz1,zce1)
    call e1z(-zz2,zce2)
    call e1z(yy1,yce1)
    call e1z(-yy2,yce2)
    call e1z(zz2,pzce2)
    call e1z(yy2,pyce2)
    call eix(afa,xafa)
    call e1xa(afa,xe1)
C
    res1 = dimag(zce2)-dimag(yce2)
    res2 = dimag(zce1)-dimag(yce1)
    res3 = dreal(zce2)-dreal(yce2)
    res4 = dreal(zce1)-dreal(yce1)
    sum1 = dimag(zce2)+dimag(yce2)
    sum2 = dreal(zce2)+dreal(yce2)
C=====
C   Bound-bound
    pbsbs = 1+(1+q*rr)*exp(-q*rr)
    pbsdbs = -(rr*exp(-q*rr)*q**2.)/2.
C   Bound-continuum
    if (k0.eq.delta/2.) then
      pbscs = sqrt(2.*q/(pi*delta))*(exp(-q*x2)*(pi+dimag(zce2))
&          -exp(q*x2)*dimag(zce1))
      pcsdbs = -sqrt(q**3./(2.*pi*delta))*(
&          exp(-q*x2)*(pi+dimag(zce2))+exp(q*x2)*dimag(zce1))
    else
      pbscs = ct1*(exp(-afa)*res1-0.5*ci*exp(afa)*(pzce2-zce1
&          -pyce2+yce1))
      pcsdbs = -ct2*(exp(-afa)*res1+0.5*ci*exp(afa)*(pzce2-zce1
&          -pyce2+yce1))
    endif
C=====
C   Matricial form
    alphas(1,1,ir) = pbsbs
    alphas(1,2,ir) = pbscs
    alphas(2,1,ir) = alphas(1,2,ir)

```

```

      alphas(2,2,ir) = 1.d0
C
      betas(1,1,ir) = pbsdbs
      betas(2,1,ir) = pcsdbs
      betas(1,2,ir) = 0.d02
      betas(2,2,ir) = 0.d0
C=====
C   Antisymmetrical inner products
C=====
C   Bound-bound
      pbaba = 1.-(1.+q*rr)*exp(-q*rr)
      pbadba = (rr*exp(-q*rr)*q**2.)/2.
C=====
C   Bound-continuum
      pbaca = ct1*(exp(-q*x2)*res3-exp(q*x2)*res4)
      pcadba = -ct2*(exp(-afa)*res3+exp(q*x2)*res4)
C=====
C   Matricial form
      alphaa(1,1,ir) = pbaba
      alphaa(1,2,ir) = pbaca
      alphaa(2,1,ir) = alphaa(1,2,ir)
      alphaa(2,2,ir) = 1.d0
C
      betaa(1,1,ir) = pbadba
      betaa(2,1,ir) = pcadba
      betaa(1,2,ir) = 0.d0
      betaa(2,2,ir) = 0.d0
C=====
C   Matrix elements
C=====
      cte1 = 8.*v0/(pi*delta)
      cte2 = v0*sqrt(8.*q/(pi*delta))
      tss = (hc**2./(6.*xmass*delta))*(k2**3.-k1**3.)
      taa = tss
      p1 = k4-k2
      p2 = k4+k2
      p3 = k4-k1
      p4 = k4+k1
      p5 = k3-k2
      p6 = k3+k2
      p7 = k3-k1
      p8 = k3+k1
      pots = cos(p1*x2)-cos(p2*x2)-cos(p3*x2)+cos(p4*x2)-cos(p5*x2)
      &
      pots = pots +cos(p6*x2)+cos(p7*x2)-cos(p8*x2)
      pota = cos(p1*x2)+cos(p2*x2)-cos(p3*x2)-cos(p4*x2)-cos(p5*x2)
      &
      pota = pota -cos(p6*x2)+cos(p7*x2)+cos(p8*x2)
C=====
C   Symmetrical matrix elements
C=====
      hbsbs = -bind*pbsbs-v0*q*exp(-q*rr)*(1.+exp(-q*rr))
      hbscs = -(cte2*(exp(-q*rr)/rr)*(sin(bta)-sin(dta))+bind*pbscs)
      hscs = tss-(cte1*0.5*pots)/rr**2.
C
      hams(1,1,ir) = hbsbs
      hams(1,2,ir) = hbscs
      hams(2,1,ir) = hams(1,2,ir)

```

```

      hams(2,2,ir) = hcscs
C=====
C   Antisymmetrical matrix elements
C=====
      hbaba = -bind*pbaba+v0*q*exp(-q*rr)*(1.-exp(-q*rr))
      hbaca = -2.*cte2*exp(-q*rr)*(sin(dta/2.)**2.
&          -sin(bta/2.)**2.)/rr-bind*pbaca
      hcaca = taa-(cte1*0.5*pota)/rr**2.
      hama(1,1,ir) = hbaba
      hama(1,2,ir) = hbaca
      hama(2,1,ir) = hama(1,2,ir)
      hama(2,2,ir) = hcaca
700 continue
C=====
C   Energy vector by parity
C=====
      e(1) = eb
      e(2) = eb
C=====
C   Complete energy vector
C=====
      en(1) = e(1)
      en(2) = e(2)
      en(3) = e(1)
      en(4) = e(2)
C=====
C   Loop over energy - semiclassical dynamics
C=====
      do 900 iecm=0,imax
          ecm = ecm1+iecm*decm
C=====
C   distance of closest approach
C=====
      rca = z1*z2*esq/ecm
      aa = rca/2.
C=====
C   asymptotic proj-tartet velocity = vasymp, beta0=vasymp/vlight
C   unit of time t0 = aa/vasymp. Time (tau) measured in t0 units.
C   vin is the initial vel. evaluated as dr/dtau=vasymp*t0.
C=====
      beta0 = sqrt(2.*ecm/xmu)
C=====
C   unit of energy if eps0 = hbar/t0 = hc*beta0/aa
C=====
      eps0 = hc*beta0/aa
C=====
C   Initial parameters in order to calculate the Rutherford
C   trajectory
C=====
      s0 = rmax/aa
      z0 = (s0-1)*(1+sqrt(1-1/(s0-1)**2))
      w0 = log(z0)
      dt = w0/ntt
C=====
C   Loop over time to calculate elastic and transfer probabilities
C=====

```

```

C   Initial conditions
C=====
C   amps = amplitudes for continuum symmetric states
C   ampa = amplitudes for continuum anti-symmetric states
C   bamps = amplitudes for bound symmetric states
C   bampa = amplitudes for bound anti-symmetric states
C   component (1) = bound
C   component (2) = continuum
C=====
      amps(1) = dcplx(1./sqrt(2.),0.)
      amps(2) = dcplx(0.,0.)
      ampa(1) = dcplx(-1./sqrt(2.),0.)
      ampa(2) = dcplx(0.,0.)
      bamps(1) = dcplx(1./sqrt(2.),0.)
      bampa(1) = dcplx(-1./sqrt(2.),0.)
C=====
C   Equale space w-mesh (Parametric representation of the hyperbola
C   in terms of a dimensionless parameter tt=w).
C   rrdot=dr/dtau
C=====
      do 300 iw=-ntt,ntt
          it=iw+ntt+1
          tt = -w0+dt*(it-1)
          tt1 = tt
          tt2 = tt
          tt3 = tt
          tt4 = tt
          tt5 = tt
          rr = aa*(cosh(tt)+1)
          tau = sinh(tt)+tt
          rrdot = aa*Sinh(tt)/(cosh(tt)+1.)
          rw(it) = rr
      300 continue
c
      do 301 iw=1,ntt
          it=iw+ntt+1
          rr=rw(it)
          if(rr.gt.100.d0) go to 301
          vpolc = ci*0.5*hc*beta0*(derlogc(iw)+derlogc(-iw))/aa
          vpolb = ci*0.5*hc*beta0*(derlogb(iw)+derlogb(-iw))/aa
      301 continue
C
C=====
C   Checking asintotic norm of the neutron wave function including
C   continuum states
C=====
      c(1) = amps(1)
      c(2) = amps(2)
      c(3) = ampa(1)
      c(4) = ampa(2)
C
      cnorm1 = abs(c(1))**2.
      cnorm2 = abs(c(2))**2.
      cnorm3 = abs(c(3))**2.
      cnorm4 = abs(c(4))**2.
      phinormc = cnorm1+cnorm2+cnorm3+cnorm4

```



```

C
    if(abs(1.d0-phinormc).gt.0.05)then
        write(*,*)' Problem: normc = ',phinormc
        stop
    end if

C=====
C   Checking asintotic norm of the neutron wave function without
C   continuum states
C=====
    bnorm1 = abs(bamps(1))**2.
    bnorm2 = abs(bampa(1))**2.
    phinormb = bnorm1+bnorm2
    if(abs(1.d0-phinormb).gt.0.05)then
        write(*,*)' Problem: normb = ',phinormb
        stop
    end if

C=====
C   probabilities calculation
C=====
    pelc = 0.5*(abs(amps(1)-ampa(1)))**2.
    pelb = 0.5*(abs(bamps(1)-bampa(1)))**2.
    ptrc = 0.5*(abs(amps(1)+ampa(1)))**2.
    ptrb = 0.5*(abs(bamps(1)+bampa(1)))**2.

C=====
    pbu = 1.-ptrc-pelc

C
    write (6,*) ecm,pelb,pelc,ptrb,ptrc
    write (7,*) ecm,pelb,pelc,ptrb,ptrc
    write (8,*) ecm,pbu

C
    900 continue
C
    1001 format(f9.4,2(2x,g12.4))
        end

C=====
*
subroutine e1z(z,ce1)
*
C=====
C   purpose: compute complex exponential integral e1(z)
C   input : z — argument of e1(z)
C   output: ce1 — e1(z)
C=====
    implicit complex*16 (c,z)
    implicit double precision (d-h,o-y)
    pi=3.141592653589793d0
    el=0.5772156649015328d0
    x=dreal(z)
    a0=cdabs(z)
    if (a0.eq.0.0d0) then
        ce1=(1.0d+300,0.0d0)
    else if (a0.le.10.0.or.x.lt.0.0.and.a0.lt.20.0) then
        ce1=(1.0d0,0.0d0)
        cr=(1.0d0,0.0d0)
    do 10 k=1,150
        cr=-cr*k*z/(k+1.0d0)**2

```

```

        ce1=ce1+cr
        if (cdabs(cr).le.cdabs(ce1)*1.0d-15) go to 15
10  continue
15  ce1=-el-cdlog(z)+z*ce1
    else
        ct0=(0.0d0,0.0d0)
        do 20 k=120,1,-1
            ct0=k/(1.0d0+k/(z+ct0))
20  continue
        ct=1.0d0/(z+ct0)
        ce1=cdexp(-z)*ct
        if (x.le.0.0.and.dimag(z).eq.0.0) ce1=ce1-pi*(0.0d0,1.0d0)
        endif
        return
    end
C=====
*
    subroutine interp(xx,coef)
*
C=====
C  Subroutine interp used to interpolate in r the coefficients
C  Xij for the differential equations
C=====
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    include 'wpacket05.dim'
    dimension coef(maxp,maxp),xx(maxp,maxp,maxr),r(maxr)
    common /rmesh/r
    common /nmesh/nrmax,npar
    common /rrr/rr
C
    dr=r(2)-r(1)
    do 14 kr=1,nrmax
        dif=rr-r(kr)
        if (dif.lt.0.d0) then
            kr2=kr
            kr1=kr-1
            goto 1
        endif
        if(abs(dif).lt.abs(dr)/10.)then
            do i=1,npar
                do j=1,npar
                    coef(i,j)=xx(i,j,kr)
                end do
            end do
        return
    end if
14  continue
    write(*,*) 'problems in interp: rr outside mesh:',
    & ' rr,rmin,rmax=',rr,r(1),r(nrmax)
1  r2=r(kr2)
    r1=r(kr1)
    do i=1,npar
        do j=1,npar
            alpha=(xx(i,j,kr2)-xx(i,j,kr1))/(r2-r1)
            coef(i,j)=xx(i,j,kr1)+alpha*(rr-r1)
        enddo
    enddo

```

```

        enddo
        return
    end
C=====
*
    subroutine cdot(time,c,derc)
*
C=====
C    used for integration of coupled equations
C=====
    implicit real*8 (a-h,o-z)
    complex*16 c,derc,ci
    complex*16 sm1,sm2,arg1,arg2,argd,ccte
    include 'wpacket05.dim'
    dimension c(maxp),derc(maxp)
    dimension alphas(maxp,maxp,maxr),betas(maxp,maxp,maxr)
    dimension alphaa(maxp,maxp,maxr),betaa(maxp,maxp,maxr)
    dimension hams(maxp,maxp,maxr),hama(maxp,maxp,maxr)
    dimension h(maxp,maxp),a(maxp,maxp),b(maxp,maxp),e(maxp)
    common/eners/alphas,betas,hams
    common/enera/alphaa,betaa,hama
    common/energy/e
    common/values/ci,eps0,pi
    common/dervr/rrdot
    common/parity/isa,icont
    common/nmesh/nrmax,npar
    common/tauw/tau
C
    if(isa.eq.1) then
        call interp (alphas,a)
        call interp (betas,b)
        call interp (hams,h)
        goto 1
    end if
C
    if(isa.eq.2) then
        call interp (alphaa,a)
        call interp (betaa,b)
        call interp (hama,h)
        goto 1
    end if
    write(*,*) 'wrong option for isa: isa = ',isa
    stop
C
1   if (icont.eq.1) then
    ccte = (ci/eps0)*(cosh(time)+1)
    gma = a(1,1)*a(2,2)-a(1,2)**2.
    sm1 = cmplx(0.d0,0.d0)
    sm2 = cmplx(0.d0,0.d0)
C
    do j=1,npar
        arg1 = -(ci/eps0)*(e(j)-e(1))*tau
        arg2 = -(ci/eps0)*(e(j)-e(2))*tau
        sm1 = c(j)*(h(1,j)-e(j))*a(1,j)-ci*eps0*rrdot*b(1,j)
&        *exp(arg1)+sm1
        sm2 = c(j)*(h(2,j)-e(j))*a(2,j)-ci*eps0*rrdot*b(2,j)

```

```

&          *exp(arg2)+sm2
C
  enddo
C
  delta = e(2)-e(1)
  argd = (ci/eps0)*delta*tau
C
  derc(1) = -(ccte/gma)*(sm1*a(2,2)-sm2*exp(-argd)*a(1,2))
  derc(2) = (ccte/gma)*(sm1*a(1,2)*exp(argd)-sm2*a(1,1))
  else
  derc(1) = -(ccte/a(1,1))*(h(1,1)-e(1)*a(1,1))*c(1)
&          -(rrdot/a(1,1))*b(1,1)*c(1)
  endif
  return
end

C=====
*
  subroutine rk4c(y,n,x,h,ydot)
*
C=====
C   Complex Runge-Kutta for the solution of differential equations
C=====
  implicit real*8(a-h,o-z)
  complex*16 y,dydx,yt,dyt,dym
  include 'wpacket05.dim'
  dimension y(maxp),dydx(maxp),yt(maxp),dyt(maxp),dym(maxp)
  external ydot
*
  hh=h*.5d0
  h6=h/6.d0
  xh=x+hh
  call ydot(x,y,dydx)
  do 11 i=1,n
    yt(i)=y(i)+hh*dydx(i)
11  continue
  call ydot(xh,yt,dyt)
  do 12 i=1,n
    yt(i)=y(i)+hh*dyt(i)
12  continue
  call ydot(xh,yt,dym)
  do 13 i=1,n
    yt(i)=y(i)+h*dym(i)
    dym(i)=dyt(i)+dym(i)
13  continue
  call ydot(x+h,yt,dyt)
  do 14 i=1,n
    y(i)=y(i)+h6*(dydx(i)+dyt(i)+2.d0*dym(i))
14  continue
  x=x+h
  return
end

C=====
*
  subroutine eix(x,ei)
*
C=====

```

```

C  purpose: compute exponential integral ei(x)
C  input : x — argument of ei(x)
C  output: ei — ei(x) ( x ≠ 0 )
C=====
  implicit double precision (a-h,o-z)
  if (x.eq.0.0) then
    ei=-1.0d+300
  else if (x.le.40.0) then
    ei=1.0d0
    r=1.0d0
    do 15 k=1,100
      r=r*k*x/(k+1.0d0)**2
      ei=ei+r
      if (dabs(r/ei).le.1.0d-15) go to 20
15  continue
20  ga=0.5772156649015328d0
    ei=ga+dlog(x)+x*ei
  else
    ei=1.0d0
    r=1.0d0
    do 25 k=1,20
      r=r*k/x
25  ei=ei+r
    ei=dexp(x)/x*ei
  endif
  return
end
C=====
*
  subroutine e1xa(x,e1)
*
C=====
C  purpose: compute exponential integral e1(x)
C  input : x — argument of e1(x)
C  output: e1 — e1(x) ( x ≠ 0 )
C=====
  implicit double precision (a-h,o-z)
  if (x.eq.0.0) then
    e1=1.0d+300
  else if (x.le.1.0) then
    e1=-dlog(x)+(((1.07857d-3*x-9.76004d-3)*x+5.519968d-2)*x
&      -0.24991055d0)*x+0.99999193d0)*x-0.57721566d0
  else
    es1=(((x+8.5733287401d0)*x+18.059016973d0)*x
&      +8.6347608925d0)*x+0.2677737343d0
    es2=(((x+9.5733223454d0)*x+25.6329561486d0)*x
&      +21.0996530827d0)*x+3.9584969228d0
    e1=dexp(-x)/x*es1/es2
  endif
  return
end
C=====

```

Bibliografia

- [1] P. E. Hodgson. *Nuclear Heavy Ion Reactions*. Oxford University Press, 1978.
- [2] R. A. Broglia and A. Winter. *Heavy Ion Reactions*, volume I. Addison Wesley Publishing Company, 1999.
- [3] G. R. Satchler. *Direct Nuclear Reactions*. Oxford University Press, 1983.
- [4] N. Austern, Y. Iseri, M. Kamimura, M. Kawai, G. Rawitscher, and M. Yashiro. *Phys. Rep.*, 154:125, 1987.
- [5] F. M. Nunes and I. J. Thompson. *Phys. Rev.*, C59:2652, 1999.
- [6] H. D. Marta et al. *Phys. Rev. C.*, **73**, 024611, (2006).
- [7] H. Goldstein, C. Poole, and J. Safko. *Classical Mechanics*. Addison Wesley Publishing Company, third edition, 2002.
- [8] K. Alder and A. Winther. *Electromagnetic Excitations*. North-Holland, Amsterdam, 1975.
- [9] J. R. Taylor. *Scattering Theory*. John Wiley, 1972.
- [10] C. J. Joachain. *Quantum Collision Theory*. John Wiley, 1961.
- [11] M. Abramowitz and I. A. Stegun. *Handbook of Mathematical Functions*. National Bureau of Standard Applies Mathematics Series, 1964.
- [12] H. Feshbach. *Theoretical Nuclear Physics: Nuclear Structure*. Jhon Wiley & Sons, 1974.
- [13] H. Feshbach. *Ann. of Phys.*, 5:357, 1958.
- [14] H. Feshbach. *Ann. of Phys.*, 19:287, 1962.
- [15] R. Donangelo, L. F. Canto, and M. S. Hussein. **A320**, 422, (1979).
- [16] K. Alder, F. Roesel, and R. Morf. *Nucl. Phys.*, A284:145, 1977.

-
- [17] A. Askar and S. Cakmak. *J. Chem. Phys.*, **68**, 2794, (1978).
- [18] L. E. Ballentine. *Quantum Mechanics. A Modern Development*. Word Scientific Publishing, 1998.
- [19] M. Kawai. *Prog. Theor. Phys. Suppl.*, 89:11, 1986.
- [20] C. A. Bertulani and L. F. Canto. *Nucl. Phys.*, A539:163, 1992.
- [21] M. S. Corrington. *Mathematics of Computation*, **15**, 73, (1961).
- [22] W. H. Press et al. *Numerical Recipes in Fortran: The Art of Scientific Computing*. Cambridge University press, second edition, 1992.
- [23] C. A. Bertulani and L. F. Canto. *Nucl. Phys.*, **A539**, 422, (1992).
- [24] R. A. Piyadasa et al. *Phys. Rev. C.*, **60**, 044611, (1999).
- [25] R. Donangelo, L. F. Canto, and M. S. Hussein. *Nucl. Phys.*, A320:422, 1979.

Livros Grátis

(<http://www.livrosgratis.com.br>)

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)
[Baixar livros de Matemática](#)
[Baixar livros de Medicina](#)
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)
[Baixar livros de Meteorologia](#)
[Baixar Monografias e TCC](#)
[Baixar livros Multidisciplinar](#)
[Baixar livros de Música](#)
[Baixar livros de Psicologia](#)
[Baixar livros de Química](#)
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)
[Baixar livros de Serviço Social](#)
[Baixar livros de Sociologia](#)
[Baixar livros de Teologia](#)
[Baixar livros de Trabalho](#)
[Baixar livros de Turismo](#)