



Università degli Studi di Milano

FACOLTÀ DI SCIENZE E TECNOLOGIE

Corso di Laurea in Fisica

TESI TRIENNALE

**Teoria del funzionale della densità:
dalla sezione d'urto sperimentale
al potenziale di Kohn-Sham**

Relatore:

Prof. Xavier Roca-Maza

Correlatore:

Prof. Gianluca Colò

Candidato:

Alberto Scalesi

Matricola 866291

1	Presentazione del lavoro svolto	10
2	Introduzione teorica	12
2.1	La teoria del funzionale densità	12
2.1.1	I Teoremi di Hohenberg e Kohn	12
2.1.2	Le equazioni di Kohn-Sham	14
2.2	Il modello a Shell	16
2.2.1	Potenziali fenomenologici	16
2.2.2	Il potenziale di Wood-Saxon	17
2.2.3	Il potenziale coulombiano	17
2.3	Scattering elettronico	18
2.3.1	Il fattore di forma	19
2.3.2	La densità di carica e di protoni	19
2.4	Distorted Wave Born Approximation	21
3	Applicazione del modello di Kohn-Sham	24
3.1	Il problema diretto	24
3.1.1	L'equazione di Schrödinger	24
3.1.2	Potenziale iniziale	26
3.1.3	Autovalori dell'energia	27
3.1.4	Autofunzioni dell'energia	27

<i>INDICE</i>	4
3.2 Il problema inverso	30
3.2.1 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham	30
3.3 Densità di nucleoni	31
3.3.1 Densità teoriche	31
3.3.2 Densità sperimentali	35
3.3.3 Simulazioni di esperimenti di scattering	36
4 Procedura computazionale	40
4.1 Autovalori e autofunzioni dell'energia	40
4.1.1 Algoritmo di shooting	40
4.2 Densità sperimentali	42
4.2.1 Dalle DCS ai fattori di forma	42
4.2.2 Dai fattori di forma alle densità	44
4.3 Dalle densità ai potenziali efficaci	47
4.3.1 Interpolazione	47
4.3.2 Algoritmo di inversione	47
4.4 Confronto dei fattori di forma	51
4.5 Densità di neutroni del ^{208}Pb	53
5 Risultati	56
5.1 Gli autovalori modificati dell'energia	64
5.2 Analisi dei risultati	65
5.2.1 I fattori di forma	65
5.2.2 Le densità	65
5.2.3 I potenziali protonici	65
5.2.4 I potenziali neutronici	66
5.2.5 Il codice	66
6 Conclusioni	68
A La trasformata di Fourier	71
B Il momento trasferito	73
C Le autofunzioni radiali	75

INDICE

5

Bibliografia

80

COSTANTI SCIENTIFICHE

In tutto il presente lavoro sono state utilizzate come unità di misura per l'energia i MeV e per le lunghezze i fm. Le costanti sono state prese da [const18].

Raggio del nucleo	$R_N = 1.2 A^{1/3} \text{ fm}$
Raggio del protone	$r_{prot} = 0.8768 \text{ fm}$
Massa del nucleone	$mc^2 = 938.27 \text{ fm}$ (non è stata considerata la leggera differenza di massa tra protoni e neutroni, né la variazione di massa dovuta alla mutua interazione tra nucleoni, ovvero la massa efficace)
Spessore della superficie nucleare	$a = 0.67 \text{ fm}$
Carica elementare	$q_e = 1.6022 \cdot 10^{-19} \text{ C} = 1.27 (\text{MeV fm})^{1/2}$
Costante di Planck	$\hbar c = 197.32 \text{ MeV fm}$

Lo scopo del presente lavoro è quello di ricavare densità nucleari e potenziali nucleari efficaci attraverso l'applicazione della Teoria del Funzionale della Densità (DFT). Questa teoria, nata per lo studio di sistemi a fermioni interagenti, può essere appositamente adattata al sistema del nucleo. Il principale vantaggio che offre questa teoria è la formalizzazione della presenza di un legame biunivoco tra l'energia totale di un sistema di fermioni e la sua densità, di cui l'energia è un funzionale.

La formulazione della DFT di Kohn e Sham costituisce una notevole semplificazione del problema e l'inversione delle equazioni di Kohn-Sham, di fatto delle equazioni alla Schrödinger, costituisce il fulcro di tutto il lavoro qui presentato, in quanto ci permette, data una certa densità di nucleoni nel nucleo, di risalire in modo univoco al potenziale che la genera.

In precedenza questa teoria è stata applicata al caso nucleare utilizzando densità derivanti da parametrizzazioni (Fermi e SOG, che verranno illustrate nel capitolo 3), per ottenere dei potenziali efficaci. I risultati ottenuti sono ragionevoli, ma possono dipendere strettamente dalla parametrizzazione che si sceglie di utilizzare per le densità.

Il punto di forza del presente studio è quello di non assumere nessun modello teorico per le densità, ma di utilizzare sezioni d'urto differenziali derivanti da esperimenti di scattering, per ricavare le densità sperimentali di nucleoni, utilizzate poi nell'algoritmo di inversione per ottenere i potenziali nucleari efficaci che le

generano.

L'utilizzo di una procedura *model independent* ha quindi il notevole vantaggio di dipendere esclusivamente dai dati ottenibili sperimentalmente, ma porta ad avere problemi che sono inevitabilmente connessi alla limitatezza qualitativa e quantitativa dei dati utilizzati. Proprio per tale limitatezza, vedremo che i dati di esperimenti reali disponibili non sono sufficienti ad affrontare il problema illustrato e saranno quindi utilizzati dati ricavati da simulazioni di esperimenti di scattering elettronico. Questo tipo di approccio ha però il vantaggio di permetterci di capire le caratteristiche che dovranno avere in futuro gli esperimenti di scattering reali per ottenere dati utili ad affrontare il problema.

CAPITOLO 1

PRESENTAZIONE DEL LAVORO SVOLTO

Definito l'approccio utilizzato per lo studio del nucleo, vediamo ora come è stato articolato il lavoro svolto.

Nel capitolo 2 è introdotta sinteticamente la DFT, che può essere rappresentata dai due teoremi di Hohenberg e Kohn. Sono quindi descritti i contributi apportati successivamente alla teoria da Kohn e Sham e il metodo con cui viene ricavato il loro set di equazioni. Si passa poi ad una digressione sul modello nucleare a Shell e sui potenziali nucleari fenomenologici che sembrano essere migliori per la descrizione del nucleo. Questa discussione è fondamentale in quanto l'algoritmo di inversione, per funzionare, ha bisogno di un potenziale di partenza che deve essere necessariamente scelto in base a considerazioni fisiche. Sono infine presentate le caratteristiche dei dati derivanti da esperimenti di scattering elettronico e il modo in cui da essi può essere ottenuta una densità di protoni.

Il capitolo 3 è interamente dedicato al problema inverso e introduce tutte le equazioni necessarie alla sua soluzione. Viene spiegato come ricavare le densità teoriche di nucleoni a partire dalla conoscenza delle autofunzioni soluzioni dell'equazione di Kohn-Sham e vengono, inoltre, presentate alcune parametrizzazioni di densità, utilizzate a scopo di confronto con quelle ottenute sperimentalmente.

Nel capitolo 4 è descritta dettagliatamente la procedura computazionale utilizzata per affrontare il problema e vengono in particolar modo evidenziati gli accorgimenti utilizzati nell'affrontare i problemi numerici e sperimentali derivanti

dai dati a disposizione. È inoltre presentato brevemente il risultato di un esperimento di scattering protonico, che ha permesso di dare una stima della densità di neutroni nei nuclei di alcuni isotopi pesanti del piombo.

Infine i capitoli 5 e 6 presentano i risultati di tutto il lavoro svolto per i nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca , ^{132}Sn e ^{208}Pb . Vengono in conclusione descritte, in base a quanto compreso, le caratteristiche che dovranno avere in futuro gli esperimenti di scattering elettronico per poter produrre dati sufficienti ad affrontare il problema di Kohn-Sham inverso nei nuclei.

2.1 La teoria del funzionale densità

2.1.1 I Teoremi di Hohenberg e Kohn

La DFT (*Density Functional Theory*) è una teoria quantistica nata per lo studio di sistemi a molti elettroni. È stata sviluppata negli anni '60 da Hohenberg e Kohn e costituisce un approccio completamente diverso rispetto ad altri metodi come quello di Hartree-Fock. Per questi infatti le grandezze fondamentali sono le funzioni d'onda $\Psi(r_x, r_y, r_z)$, che per un sistema ad N particelle portano ad avere una dipendenza della funzione d'onda totale da $3N$ variabili.

Il vantaggio della DFT consiste nel considerare come grandezza fondamentale la densità totale $n(\mathbf{r})$ del sistema, che dipende sempre solo da tre incognite, indipendentemente dal numero di particelle appartenenti al sistema. Lo studio di Hohenberg e Kohn è mirato al problema di un gas non omogeneo di elettroni, ma può essere facilmente esteso a sistemi a più fermioni interagenti. In particolare nel presente lavoro è stato utilizzato per lo studio dei nuclei.

Enunciamo ora i due teoremi fondamentali della DFT, in riferimento all'articolo [HK64]. Consideriamo un sistema costituito da fermioni interagenti sottoposti ad un potenziale esterno $v(\mathbf{r})$. Possiamo scrivere esplicitamente l'Hamiltoniana del

sistema come

$$H = T + V + U \quad (2.1.1)$$

dove T è l'energia cinetica complessiva del sistema, V l'energia potenziale associata all'interazione del sistema con l'esterno e U l'energia potenziale data dalla mutua interazione delle particelle del sistema:

$$T := \frac{1}{2} \int \nabla \psi^*(\mathbf{r}) \nabla \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.1.2)$$

$$V := \int v(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.1.3)$$

$$U := \frac{1}{2} \int \psi^*(\mathbf{r}) \psi^*(\mathbf{r}') u(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}') \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.1.4)$$

mentre la densità dello stato fondamentale è data da

$$n(\mathbf{r}) := \langle \mathbf{r} | \Psi \rangle \langle \Psi | \mathbf{r} \rangle = |\psi(\mathbf{r})|^2 \quad (2.1.5)$$

che è un funzionale di $v(\mathbf{r})$, ovvero dipende dal potenziale esterno.

Teorema 1 *Dato un sistema con N fermioni interagenti in un potenziale esterno v , esiste una corrispondenza biunivoca tra l'energia totale in presenza di v (definita come funzionale della densità n delle particelle) e la densità stessa.*

Il secondo teorema segue direttamente dal primo, ed è un principio variazionale. Essendo Ψ un funzionale di $n(\mathbf{r})$, dovranno esserlo anche l'energia cinetica e quella di interazione. Definiamo allora

$$F[n(\mathbf{r})] := \langle \Psi | T + U | \Psi \rangle \quad (2.1.6)$$

dove $F[n]$ è il *funzionale universale di Hohenberg e Kohn*, valido per qualunque numero di particelle e in un potenziale esterno generico. Definiamo allora il funzionale energia:

$$\mathcal{E}[n] := \int v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + F[n] \quad (2.1.7)$$

Chiaramente, inserendo nell'equazione (2.1.7) la densità $n(\mathbf{r})$ del ground state si ottiene la relativa energia per lo stato fondamentale.

Teorema 2 *Il funzionale energia $\mathcal{E}[n]$ presenta un minimo all'esatta densità dello stato fondamentale e in tale punto assume esattamente l'energia dello stato fondamentale del sistema.*

Densità di spin

La densità a cui fanno riferimento i teoremi di Hohenberg e Kohn è stata finora riferita ad un numero di particelle per unità di volume. Possiamo però generalizzare questo discorso ad altri tipi di densità, come la densità di spin. Il sistema che vogliamo studiare e a cui vogliamo applicare la DFT è infatti il nucleo, composto da fermioni aventi un'autofunzione dipendente da un termine di spin. La densità di spin è data da

$$s(\mathbf{r}) = \sum_{i\sigma\sigma'} \psi_i^*(\mathbf{r}, \sigma) \hat{\sigma} \psi_i(\mathbf{r}, \sigma') \quad (2.1.8)$$

Questo termine è però nullo se le shell nucleari sono chiuse, come nel caso di tutti i nuclei che studieremo. Per questo nel presente lavoro non sono stati considerati i termini di spin.

2.1.2 Le equazioni di Kohn-Sham

Una riscrittura della DFT in una forma per noi più utile deriva da un articolo [KS65] di Kohn e Sham. La loro idea consiste nel considerare, invece che un sistema costituito da particelle interagenti in un potenziale esterno, un sistema equivalente, in cui le particelle siano non interagenti e con una opportuna modifica del potenziale esterno. Tale modifica deve naturalmente mantenere inalterata la densità $n(\mathbf{r})$. A ciascun fermione si associa un'autofunzione di particella singola $\psi_i(\mathbf{r})$, detta *orbitale di Kohn-Sham*, e la funzione d'onda totale può essere rappresentata da un determinante di Slater. La densità del sistema fermionico sarà data da

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (2.1.9)$$

Tenendo conto di quanto detto, riscriviamo l'equazione (2.1.6) come

$$F[n] := T_{ni}[n] + E_{xc}[n] \quad (2.1.10)$$

dove $T_{ni}[n]$ è l'energia cinetica complessiva del sistema di elettroni non interagenti e $E_{xc}[n]$ l'energia di scambio e correlazione di un sistema di elettroni interagenti con densità $n(\mathbf{r})$. $T_{ni}[n]$ può essere esplicitato come

$$T_{ni}[n] = \sum_i -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \Delta \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \quad (2.1.11)$$

Cerchiamo ora di determinare il minimo del funzionale energia. Imponiamo quindi che la sua variazione si annulli:

$$\delta E = 0 \quad (2.1.12)$$

La condizione di normalizzazione porta ad avere

$$\int \delta n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = 0 \quad (2.1.13)$$

e per la richiesta di ortonormalità delle funzioni d'onda¹ otteniamo

$$\delta \left(E - \sum_i \varepsilon_i \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) = 0 \quad (2.1.14)$$

Eseguiamo la variazione (2.1.12) rispetto a ψ_i^*

$$\begin{aligned} \frac{\delta}{\delta \psi_i^*} \left(\sum_i -\frac{1}{2} \int \psi_i^*(\mathbf{r}) \Delta \psi_i(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + E_{xc}[n(\mathbf{r})] + \int v(\mathbf{r}) n(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \right. \\ \left. - \sum_i \varepsilon_i \int \psi_i(\mathbf{r}) \psi_i^*(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right) = 0 \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

e per mezzo delle identità

$$\frac{\delta n}{\delta \psi_i^*} = \psi_i \quad \frac{\delta}{\delta \psi_i^*} = \frac{\delta n}{\delta \psi_i^*} \frac{\delta}{\delta n} = \psi_i \frac{\delta}{\delta n} \quad (2.1.16)$$

otteniamo infine le *equazioni di Kohn-Sham*:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.1.17)$$

¹che si traduce nell'applicazione di un moltiplicatore di Lagrange

Definendo il potenziale di Kohn-Sham come

$$v_{KS}(\mathbf{r}) = \frac{\delta E_{xc}[n(\mathbf{r})]}{\delta n(\mathbf{r})} + v(\mathbf{r}) \quad (2.1.18)$$

le equazioni (2.1.17) assumono una forma alla Schrödinger

$$\left[-\frac{\Delta}{2} + v_{KS}(\mathbf{r}) \right] \psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \psi_i(\mathbf{r}) \quad (2.1.19)$$

In questa equazione $v_{KS}(\mathbf{r})$ è un potenziale efficace di campo medio. Nota quindi la densità $n(\mathbf{r})$, è possibile risalire univocamente al potenziale efficace che la genera.

2.2 Il modello a Shell

2.2.1 Potenziali fenomenologici

Per descrivere la disposizione dei nucleoni lungo i vari livelli energetici è conveniente utilizzare, in analogia con la fisica atomica, un modello a gusci. Nel presente elaborato si è lavorato in simmetria sferica, perciò le shell considerate sono sferiche. Sperimentalmente si osserva che alcuni nuclei sono fortemente più stabili di altri, e ciò avviene in corrispondenza di un determinato numero di nucleoni, detto *numero magico*. Ne consegue che in tale modello questi numeri corrisponderanno ad una chiusura delle shell. Ci si può quindi chiedere quale sia il potenziale nucleare di campo medio (di cui non è nota una forma analitica) che riproduca queste stabilità nucleari osservate in laboratorio.

Storicamente i primi candidati sono stati la buca di potenziale infinita e l'oscillatore armonico. La prima tuttavia non riproduce correttamente l'energia cinetica e potenziale dei nucleoni. Il vantaggio di utilizzare un potenziale armonico è che possono essere ricavati analiticamente sia la sua forma analitica che quella dei suoi autovalori:

$$v_{arm}(r) = \frac{1}{2} m_N \omega^2 r^2 \quad E = \hbar \omega \left(2n + l + \frac{3}{2} \right) \quad (2.2.1)$$

dove

$$\hbar \omega = \frac{41}{A^{1/3}} \text{MeV} \quad (2.2.2)$$

che si ottiene per confronto tra il raggio quadratico medio nucleare e i dati sperimentali. Questo potenziale sembra un buon candidato per descrivere stati vicino all'equilibrio, ma i calcoli analitici mostrano che è in grado di riprodurre solo i primi tre numeri magici. Inoltre la sua divergenza per grandi distanze suggerisce che tale potenziale non sia in grado di riprodurre le situazioni fisiche di nostro interesse.

2.2.2 Il potenziale di Wood-Saxon

Assumendo un potenziale nucleare come quello di Wood-Saxon si ha un miglior accordo con i dati sperimentali ed includendo un termine di spin-orbita si ha una spiegazione ragionevole dei numeri magici. La forma analitica del potenziale è la seguente:

$$v_{WS}(r) = -\frac{V_0}{1 + e^{\frac{r-R_N}{a}}} \quad (2.2.3)$$

dove V_0 è la profondità della buca, R_N il raggio nucleare e a lo spessore superficiale del nucleo. Per esprimere il raggio nucleare è stata utilizzata la diffusa approssimazione $R_N = (1.2 \text{ fm})A^{1/3}$. Il coefficiente V_0 include un termine di simmetria:

$$V_0 = 51 \pm 33 \frac{N - Z}{N + Z} \text{ MeV} \quad (2.2.4)$$

dove il segno positivo e negativo valgono rispettivamente per protoni e neutroni. Tale equazione riproduce fenomenologicamente la maggiore intensità del legame p-n rispetto a quelli p-p e n-n. Gli autovalori del potenziale di Wood-Saxon sono compresi tra quelli della buca di potenziale infinita e quelli dell'oscillatore armonico. Il punto debole per l'utilizzo di questo potenziale è che non permette di ottenere una forma analitica per le funzioni d'onda, ma deve essere necessariamente risolto numericamente.

2.2.3 Il potenziale coulombiano

Nonostante la repulsione coulombiana dei protoni sia molto piccola rispetto all'attrazione tra nucleoni, è necessario tenere conto dei fenomeni di repulsione elettromagnetica che avvengono all'interno del nucleo. Nell'approssimazione più elementare possiamo assumere che il nucleo sia una distribuzione omogenea sferica

di carica, con densità di carica

$$n_{ch}(r) = \frac{Zq_e}{\frac{4}{3}\pi R_N^3} \quad (2.2.5)$$

dove q_e è la carica elementare e Z il numero di protoni contenuti nel nucleo. Il potenziale coulombiano è allora dato dalla seguente forma analitica:

$$v_C(r) = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{Zq_e^2}{R_N} \left[3 - \left(\frac{r}{R_N} \right)^2 \right] & r \leq R_N \\ \frac{Zq_e^2}{r} & r > R_N \end{cases} \quad (2.2.6)$$

Questa formula può essere migliorata attraverso la sostituzione

$$R_U = R_N \sqrt{\frac{1 + (5s^2/2R_N^2)}{1 + (3s^2/4R_N^2)}} \quad (2.2.7)$$

con $s = 2.0$ fm (come riportato nell'articolo [SJP05]), in quanto replica i risultati che si ottengono scegliendo una distribuzione di Fermi per la carica nucleare.

2.3 Scattering elettronico

Per indagare le densità nucleari si utilizzano solitamente esperimenti di scattering elettronico e adronico. Con questi possono essere studiate sia la densità di protoni che di neutroni nel nucleo, ma quest'ultima è più complicata da determinare in quanto i neutroni non interagiscono elettromagneticamente. Per studiarli è allora conveniente utilizzare esperimenti di scattering protonico, come spiegato a fine del capitolo 4.

Nel presente lavoro ci focalizziamo sullo scattering elettronico, che permette di ottenere dall'interazione coulombiana tra elettroni e protoni una sezione d'urto differenziale (DCS) per i protoni. Da questa è possibile determinare il fattore di forma elettromagnetico del nucleo e, a partire da questo, la densità di protoni presenti nel nucleo. Vediamo ora nei dettagli il procedimento.

2.3.1 Il fattore di forma

Per descrivere lo stato dell'elettrone proiettile è utile utilizzare la *Plane Wave Born Approximation* (PWBA), che approssima la funzione d'onda della particella con un'onda piana incidente. Possiamo scrivere allora la sezione d'urto sperimentale come

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{exp} = \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{Mott}^{PWBA} |F(q)|^2 \quad (2.3.1)$$

dove la sezione d'urto di Mott in PWBA è data da quella di Rutherford moltiplicata per un fattore di correzione che tiene conto dello spin dell'elettrone incidente

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{Mott}^{PWBA} = \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{Ruth} \cos^2\left(\frac{\theta}{2}\right) \quad (2.3.2)$$

mentre la sezione d'urto di Rutherford è a sua volta data da

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{Ruth} = \left(\frac{Z\alpha \hbar c}{2 E} \right)^2 \frac{1}{\sin^4 \theta/2} \quad (2.3.3)$$

dove θ è l'angolo di scattering, Z il numero di protoni del nucleo bersaglio, E l'energia dell'elettrone incidente e α la costante di struttura fine.

Per inversione dell'equazione (2.3.1) possiamo quindi determinare il fattore di forma nucleare.

2.3.2 La densità di carica e di protoni

Una volta ottenuto il fattore di forma, la densità di carica può essere determinata da un'antitrasformata di Fourier dallo spazio dei momenti a quello delle coordinate.

$$n(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\Omega} d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{q}) \quad (2.3.4)$$

Questa equazione può essere semplificata, eliminando la parte immaginaria. I conti dettagliati sono riportati in appendice A e portano all'equazione

$$n(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dq q \frac{\sin qr}{r} F(q) \quad (2.3.5)$$

Per passare dallo spazio delle coordinate a quello dei momenti, si trasformano le variabili indipendenti attraverso l'equazione $r = 2\pi/q$. Si avrà $r_{min} = 2\pi/q_{max}$ e $r_{max} = 2\pi/q_{min}$. L'integrale, come spiegato nel dettaglio più avanti, porterà ad avere una serie di problemi pratici, dati dal fatto che, per la limitatezza dei dati sperimentali, non è possibile avere un range infinito di valori di q .

È inoltre necessario determinare un'espressione analitica per il momento trasferito q . In appendice B è ricavata l'espressione nel limite relativistico

$$q = \frac{2E}{hc} \sin \frac{\theta}{2} \quad (2.3.6)$$

La densità calcolata dall'equazione (2.3.5) è una densità di carica. Questa è legata alla densità di protoni da una convoluzione

$$n_{ch}(\mathbf{r}) = [G_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}') * n_{prot}(\mathbf{r}')](\mathbf{r}) = \int G_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}') n_{prot}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' \quad (2.3.7)$$

dove $G_p(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ è il fattore di forma del protone in spazio di coordinate, ovvero la densità associata ad un singolo protone. Per esplicitare la densità di protoni è necessario operare una deconvoluzione, ed è conveniente fare ciò nello spazio degli implusi

$$F_{prot}(\mathbf{q}) = \frac{F_{ch}(\mathbf{q})}{G_p(\mathbf{q})} \quad (2.3.8)$$

dove $G_p(\mathbf{q})$ è il fattore di forma del singolo protone, data da

$$G_p(\mathbf{q}) = e^{-\frac{q^2 \alpha^2}{4}} \quad (2.3.9)$$

con α dipendente dalla radice del raggio quadratico medio del protone ($\langle r_p^2 \rangle^{1/2} \approx 0.8751 \text{ fm}$):

$$\alpha = \sqrt{\frac{2}{3} \langle r_p^2 \rangle}^{1/2} \quad (2.3.10)$$

La differenza tra i fattori di forma di carica e protonici è molto sottile, per questo nel presente lavoro sono state calcolate le densità di carica. A scopo dimostrativo in **Figura 2.1** sono confrontate le densità (derivanti dal modello G2, spiegato in dettaglio più avanti) di carica e di protoni per il Piombo 208.

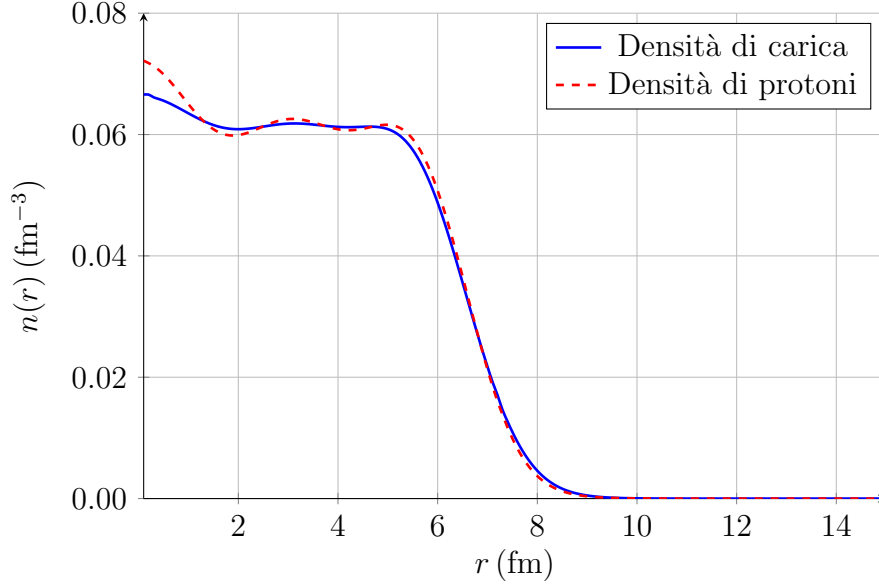


Figura 2.1: Confronto tra la densità di carica e la densità di protoni per il nucleo di Piombo 208, calcolate con il modello G2

2.4 Distorted Wave Born Approximation

Un approccio più realistico per la descrizione dello stato dell'elettrone incidente consiste nell'utilizzare la *Distorted Wave Born Approximation* (DWBA). In questa approssimazione l'elettrone incidente dell'esperimento di scattering non è più considerato come un'onda piana, ma come un'onda sferica. L'equazione (2.3.1) viene allora modificata nella seguente forma

$$\left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{exp} = \left. \frac{d\sigma}{d\Omega} \right|_{Mott}^{DWBA} |F(q)|^2 \quad (2.4.1)$$

dove la sezione d'urto di Mott in DWBA non ha una forma analitica, ma si ottiene numericamente risolvendo le equazioni di scattering dell'articolo [Roc+08], assumendo che la carica sia concentrata in un punto geometrico di carica Z .

L'approssimazione PWBA, nonostante sia meno realistica della DWBA, è sufficiente per una determinazione accurata della DCS. A titolo dimostrativo, la **Figura 2.2** rappresenta la differenza tra le DCS calcolate con le due approssimazioni. Come si può vedere, la loro differenza inizia ad essere significativa per angoli mag-

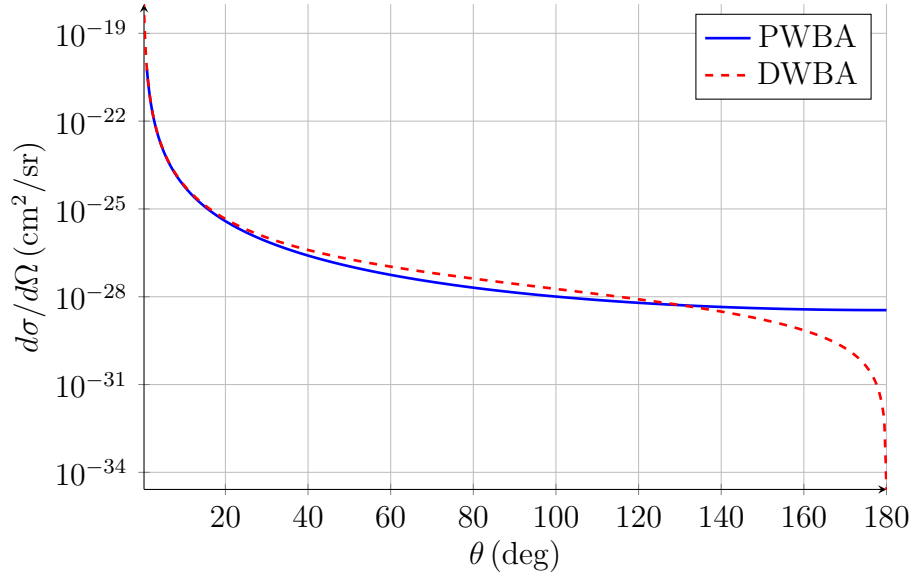


Figura 2.2: Confronto tra la sezione d'urto differenziale di Mott in PWBA e in DWBA per energie di scattering 1000 MeV per il ^{208}Pb

giori di 160° , per questo motivo, avendo utilizzato la PWBA, nel presente lavoro sono stati utilizzati solamente angoli di scattering inferiori a 150° .

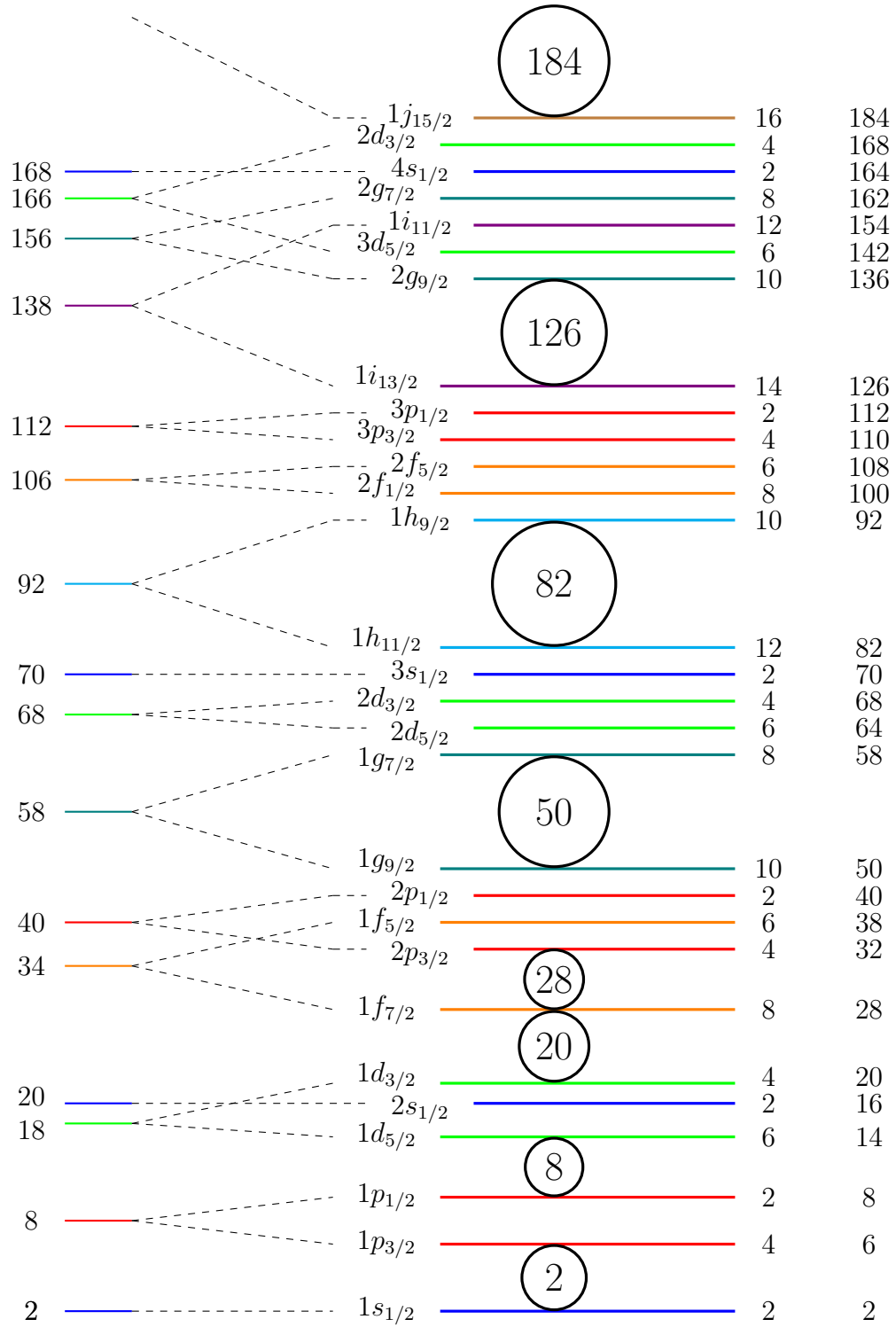


Figura 2.3: Rappresentazione dei livelli energetici del modello nucleare a shell

CAPITOLO 3

APPLICAZIONE DEL MODELLO DI KOHN-SHAM

3.1 Il problema diretto

Affrontiamo ora il problema diretto, che consiste nel risolvere l'equazione di Kohn-Sham per un dato potenziale esterno.

3.1.1 L'equazione di Schrödinger

Partiamo ora dall'equazione di Kohn-Sham per cercare di determinare, a partire da una densità di nucleoni, il potenziale nucleare associato che la genera. Come stabilito dal primo teorema di Hohenberg e Kohn tale potenziale, data una certa densità, è unico.

Il primo problema da affrontare è risolvere l'equazione di Schrödinger per un nucleone in un potenziale esterno $V_{ext}(r)$. Dato un sistema di riferimento sferico, l'autofunzione totale può essere fattorizzata isolando il contributo radiale: $\Psi(r, \theta, \phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)$. Operando in questo modo si ottiene un'equazione differenziale per ogni coordinata.

Consideriamo l'equazione di Schrödinger radiale.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V_{ext}(r) \right] R(r) = ER(r) \quad (3.1.1)$$

dove

$$\nabla_r^2 = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \right) \quad (3.1.2)$$

mentre il secondo termine è un contributo centrifugo, con $\hbar^2 l(l+1)$ autovalori del momento angolare orbitale. Nel presente elaborato m è stato approssimato con la massa del nucleone e non con una massa ridotta. Per una discussione più approfondita sulla massa efficace da utilizzare si rimanda a [Cue17]. L'equazione (3.1.1) può essere semplificata con cambio di variabili

$$u(r) = rR(r) \quad (3.1.3)$$

dove $u(r)$ è chiamata *funzione radiale ridotta*. La derivata nel primo membro dell'equazione (3.1.1) diventa

$$\begin{aligned} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d}{dr} \left(r^{-1} u(r) \right) \right) &= \frac{d}{dr} \left(r^2 \left(-r^{-2} u(r) + r^{-1} \frac{du}{dr} \right) \right) = \\ &= \frac{d}{dr} \left(-u(r) + r \frac{du(r)}{dr} \right) = -\frac{du(r)}{dr} + \frac{du(r)}{dr} + r \frac{d^2 u(r)}{dr^2} = r \frac{d^2 u(r)}{dr^2} \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

Inserendo questa sostituzione nell'equazione (3.1.1) e moltiplicando per r , otteniamo l'equazione *radiale ridotta*

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2mr^2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V_{ext}(r) \right] u(r) = Eu(r) \quad (3.1.5)$$

Essendo un'equazione differenziale del secondo ordine, per essere risolta univocamente necessita di alcune condizioni al contorno

$$\lim_{r \rightarrow 0} u(r) \sim r^{l+1} \quad (3.1.6)$$

$$\lim_{r \rightarrow 0} u'(r) \sim (l+1)r^l \quad (3.1.7)$$

L'equazione (3.1.5) ha due differenti variabili incognite: l'autovalore dell'energia E e l'autofunzione $u(r)$. Nonostante ciò, possiamo riuscire a dare una ragionevole stima di queste quantità attraverso la seguente considerazione: poiché il potenziale nucleare può essere sommariamente approssimato da una buca di potenziale,

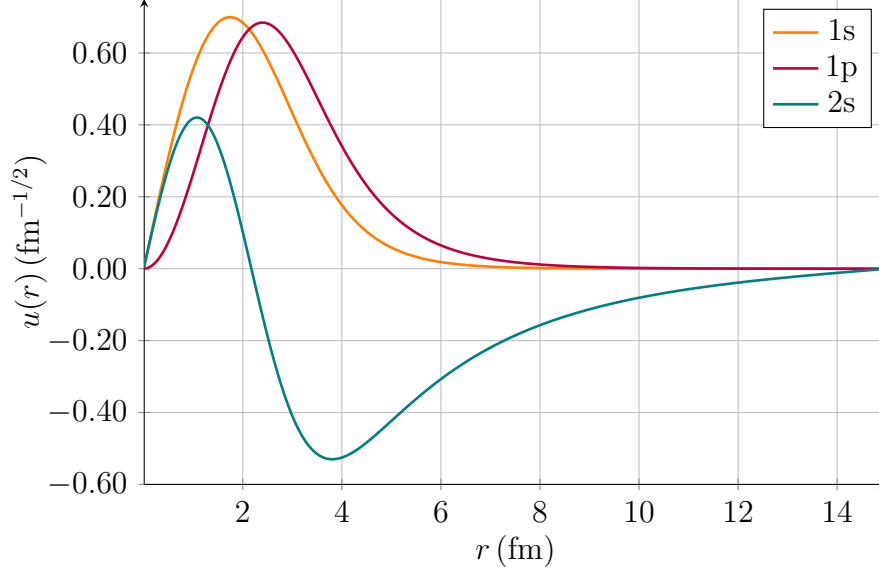


Figura 3.1: Autofunzioni radiali ridotte per i protoni del ^{16}O

al di fuori di questa buca ogni autofunzione è esponenzialmente soppressa a 0. Abbiamo quindi una condizione al contorno addizionale per risolvere il problema, implementata nel codice dalla seguente equazione

$$|u(r_{max})| < \varepsilon \quad (3.1.8)$$

dove ε può essere scelto piccolo a piacere in base alla precisione desiderata.

3.1.2 Potenziale iniziale

Un punto critico per risolvere l'equazione (3.1.5) è la scelta del potenziale esterno iniziale $V_{ext}(r)$. Per motivi computazionali è però necessario che il potenziale di partenza sia verosimilmente vicino a quello che dovrà produrre il processo di inversione, altrimenti l'algoritmo utilizzato potrebbe non convergere. In riferimento a quanto spiegato nell'introduzione, la scelta del potenziale iniziale è ricaduta su una funzione somma del potenziale di Wood-Saxon e coulombiano (quest'ultimo solo nel caso dei protoni)

$$V_{in} = V_{WS} + V_{coul} \quad (3.1.9)$$

Nel presente lavoro non si è tenuto conto di eventuali effetti di spin-orbita, in quanto non modificano significativamente le funzioni d'onda e quindi il potenziale di Kohn-Sham ricavato può essere introdotto successivamente con un teoria perturbativa.

3.1.3 Autovalori dell'energia

Una volta scelto il potenziale (3.1.9), l'equazione (3.1.5) ha due incognite: le autoenergie e le autofunzioni radiali. Per determinare contemporaneamente queste due quantità si è fatto uso di un *algoritmo di shooting*, spiegato in dettaglio nel prossimo capitolo. Per quanto riguarda gli autovalori energetici, considerando che vogliamo studiare lo stato legato del nucleo, sono stati cercati solo autovalori negativi. I risultati sono stati riassunti nella tabella **Tabella 3.1**. Confrontando l'energia di protone per il ^{40}Ca e il ^{48}Ca , si può notare che quelli del ^{48}Ca sono più bassi rispetto a quelli del ^{40}Ca . Questo è dovuto alla maggiore intensità del legame p-n rispetto a quello n-n.

3.1.4 Autofunzioni dell'energia

Attraverso l'equazione (3.1.5) e l'algoritmo di shooting sono state determinate le autofunzioni radiali (**Figure 5.3**). Per i grafici relativi alle autofunzioni radiali del ^{16}O , ^{40}Ca e ^{208}Pb si rimanda all'appendice C. Come mostrato nei grafici, ogni autofunzione radiale ha $n - 1$ nodi, dove n è il numero quantico principale. Per semplicità, nella presente discussione l'origine non è stata considerata un nodo.

Si può notare inoltre che le uniche autofunzioni che non si annullano per $r = 0$ sono quelle con numero quantico $l = 0$. Questo è dovuto al fatto che il termine centrifugo si annulla per questi valori, mentre, se il numeratore fosse diverso da zero, si avrebbe una divergenza di questo termine a causa del termine proporzionale a r^2 al denominatore.

orb[¹⁶ O]	E_{neut} [MeV]	E_{prot} [MeV]
1s	-31.06	-27.10
1p	-16.84	-13.17
1d	-3.11	-0.95
2s	-3.93	—

orb[⁴⁰ Ca]	E_{neut} [MeV]	E_{prot} [MeV]
1s	-38.82	-30.88
1p	-28.62	-21.06
1d	-17.41	-10.22
2s	-15.63	-8.45
1f	-5.77	—
2p	-4.82	—

orb[⁴⁸ Ca]	E_{neut} [MeV]	E_{prot} [MeV]
1s	-35.00	-37.59
1p	-26.00	-28.19
1d	-16.01	-17.59
2s	-14.21	-15.37
1f	-5.53	-6.27
2p	-4.37	-4.27

orb[²⁰⁸ Pb]	E_{neut} [MeV]	E_{prot} [MeV]
1s	-39.95	-33.23
1p	-35.98	-29.66
1d	-31.19	-25.07
2s	-29.45	-22.60
1f	-25.69	-19.64
2p	-23.06	-16.15
1g	-19.58	-13.48
2d	-16.28	-9.24
3s	-15.12	-7.70
1h	-12.92	-6.67
2f	-9.29	-1.98
3p	-7.82	—
1i	-5.80	—
2g	-2.33	—
3d	-31.19	—
4s	-1.09	—

Tabella 3.1: Autovalori di energia per l'Ossigeno 16, il Calcio 40–48 e il Piombo 208

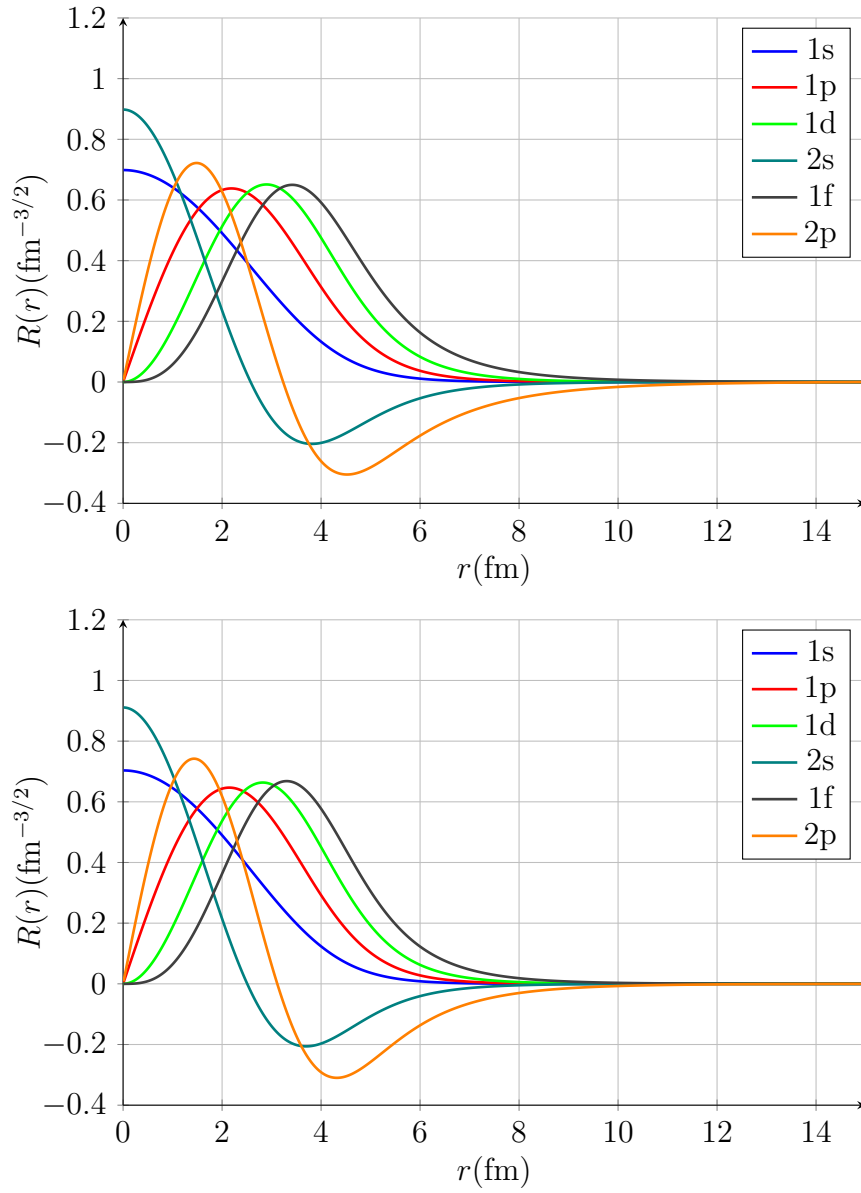


Figura 3.2: Autofunzioni radiali per i neutroni (pannello superiore) e i protoni (pannello inferiore) del calcio ^{48}Ca

3.2 Il problema inverso

3.2.1 Inversione delle equazioni di Kohn-Sham

I risultati dell'applicazione della DFT al caso dei fermioni nucleari può essere riassunto dal seguente set di equazioni:

$$\varepsilon_j \phi_j(\mathbf{r}) = \left[-\frac{\Delta}{2} + v_{KS}([n], \mathbf{r}) \right] \phi_j(\mathbf{r}) \quad (3.2.1a)$$

$$n(\mathbf{r}) = 2 \sum_{j=1}^N |\phi_j(\mathbf{r})|^2 \quad (3.2.1b)$$

$$v_{KS}([n], \mathbf{r}) = v_{ext}(\mathbf{r}) + v_H([n], \mathbf{r}) + v_{xc}([n], \mathbf{r}) \quad (3.2.1c)$$

Il metodo di inversione utilizzato nel presente elaborato è un algoritmo di tipo iterativo proposto da Van Leeuwen e Baerends [LB94]. Per ottenere le equazioni da utilizzare, moltiplichiamo l'equazione (3.2.1a) da entrambi i lati per $\phi_j^*(\mathbf{r})$ e sommando sull'indice j , ottenendo quindi

$$\sum_{j=1}^N \varepsilon_j |\phi_j(\mathbf{r})|^2 = \sum_{j=1}^N \left[-\phi_j^*(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} + v_{KS}([n], \mathbf{r}) |\phi_j(\mathbf{r})|^2 \right]$$

Dividendo ora per $n(\mathbf{r})$, dato dall'equazione (3.2.1b), si ottiene

$$v(\mathbf{r}) = \frac{1}{n(\mathbf{r})} \sum_{j=1}^N \left[\phi_j^*(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \phi_j(\mathbf{r}) \varepsilon_j |\phi(\mathbf{r})|^2 \right]$$

A partire da questa equazione si può costruire uno schema iterativo, sostituendo la densità presente al denominatore con una densità sperimentale ed ottenendo ad ogni iterazione un nuovo potenziale

$$v^{k+1}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\tilde{n}(\mathbf{r})} \sum_{j=1}^N \left[\phi_j^{*k}(\mathbf{r}) \frac{\Delta}{2} \phi_j^k(\mathbf{r}) \varepsilon_j^k |\phi^k(\mathbf{r})|^2 \right] = \frac{n^k(\mathbf{r})}{\tilde{n}(\mathbf{r})} v^k(\mathbf{r}) \quad (3.2.2)$$

Questo metodo, valido per i sistemi fermionici, perde però di validità nel caso di potenziali attrattivi. È quindi necessario conformare l'equazione iterativa (3.2.2)

al caso di potenziali nucleari, che sono almeno in larga parte attrattivi. In riferimento a [Por16], utilizziamo quindi il seguente sistema di equazioni, appositamente adattato al caso nucleare:

$$v^{k+1}(r) = \begin{cases} \left(2 - \frac{n^k(r)}{\tilde{n}(r)}\right)v^k(r) & v^k(r) \leq 0 \\ \frac{n^k(r)}{\tilde{n}(r)}v^k(r) & v^k(r) > 0 \end{cases} \quad (3.2.3)$$

3.3 Densità di nucleoni

Per risolvere iterativamente l'equazione (3.2.3) è necessario determinare la *densità teorica* $n^k(\mathbf{r})$ e la *densità sperimentale* $\tilde{n}(\mathbf{r})$. Poiché lo scopo principale del presente lavoro è quello di ricavare potenziali nucleari efficaci senza assumere alcun modello per la densità nucleare, sono stati utilizzati due tipi di densità parametrizzate (Fermi e SOG) solo a scopo di confronto con i risultati finali, ma la parte principale del lavoro consiste nell'utilizzo delle densità di protoni derivanti da simulazioni di esperimenti di scattering e nel procedimento con cui queste possono essere ottenute (come spiegato in dettaglio nel capitolo 4).

3.3.1 Densità teoriche

Per determinare una forma per le densità teoriche è stata utilizzata la seguente equazione in coordinate sferiche:

$$n(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) u_{\alpha}^2(r) \quad (3.3.1)$$

che permette di ottenere $n(r)$ a partire dalle autofunzioni radiali del nucleo considerato e dal numero di occupazione dei nucleoni nelle varie shell. α include i numeri quantici n , l e j (momento angolare totale, $j = l \pm 1/2$ dato che tutte le particelle sono nucleoni). Il termine $(2j_{\alpha} + 1)$ implica che sono state considerate solamente shell complete (tutti i nuclei utilizzati sono magici rispetto al nucleone considerato). I dati ottenuti sono stati tracciati in **Figura 3.3** e **3.4**, che rappre-

sentano le densità teoriche di neutroni e protoni per ciascun nucleo in funzione del raggio.

È da notare che il termine $1/r^2$ non fa divergere l'equazione (3.3.1) in quanto $u(r) \propto r$, perciò la densità dovrà assumere un valore ben definito per $r = 0$.

La normalizzazione delle funzioni d'onda radiali ridotte implica la normalizzazione delle densità rispetto al numero di nucleoni:

$$\begin{aligned} \int d\mathbf{r} n_n(\mathbf{r}) &= 4\pi \int dr r^2 n_n(r) = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \int u_{\alpha}^2(r) = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) = N \\ \int d\mathbf{r} n_p(\mathbf{r}) &= 4\pi \int dr r^2 n_p(r) = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) \int u_{\alpha}^2(r) = \sum_{\alpha} (2j_{\alpha} + 1) = Z \end{aligned} \tag{3.3.2}$$

Dove N e Z rappresentano rispettivamente il numero di neutroni e di protoni.

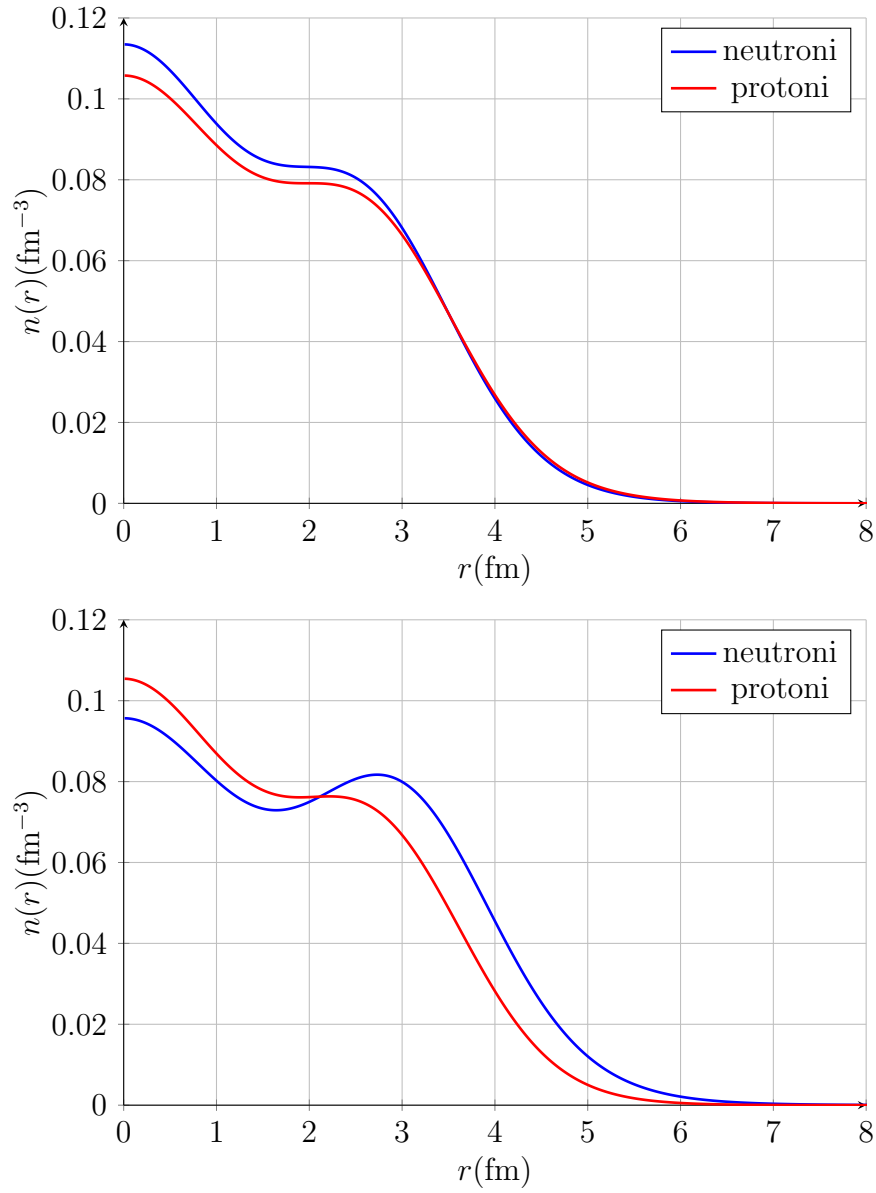


Figura 3.3: Densità di nucleoni per il calcio ^{40}Ca (su) e il calcio ^{48}Ca (giù), per un potenziale esterno somma di potenziali di Wood-Saxon e coulombiano

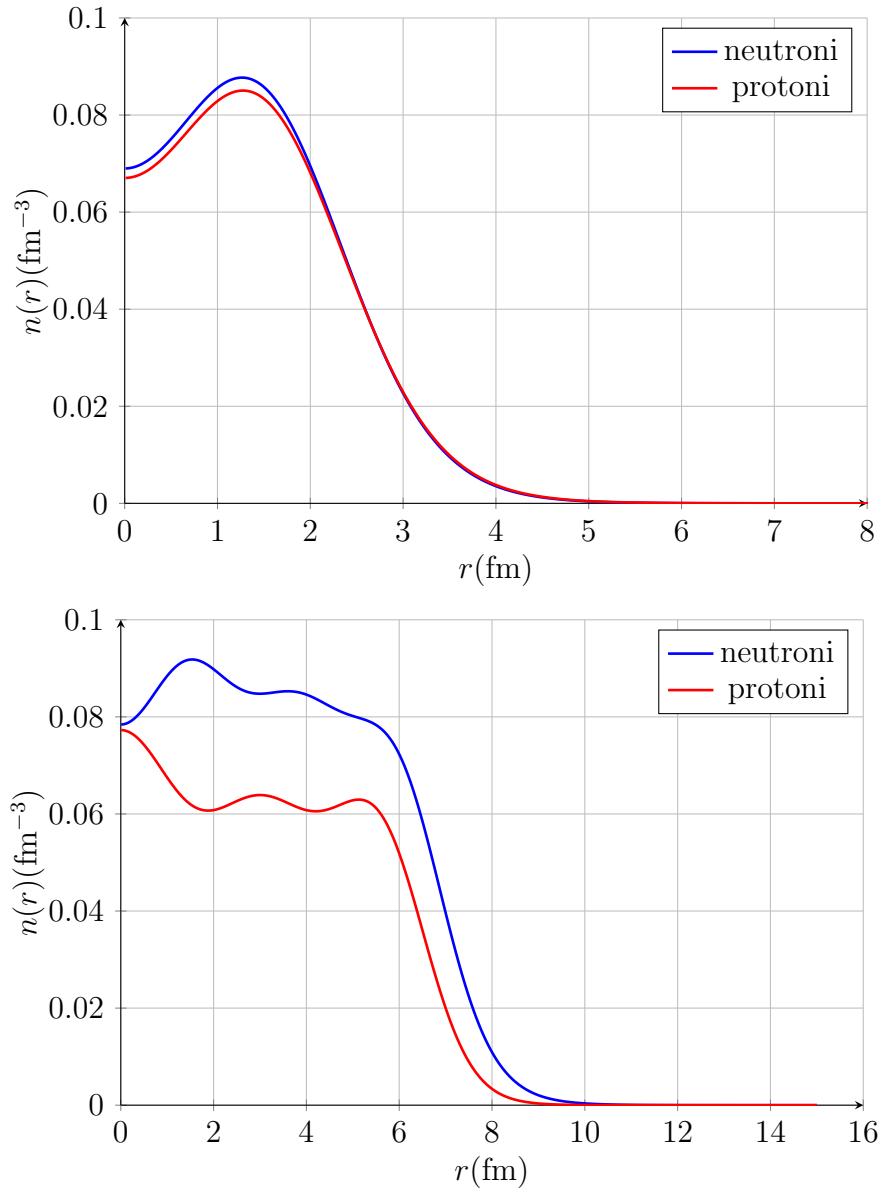


Figura 3.4: Densità teoriche di nucleoni per l'ossigeno ^{16}O (su) e il piombo ^{208}Pb (giù), per un potenziale esterno somma di potenziali di Wood-Saxon e coulombiano

3.3.2 Densità sperimentali

Fit di Fermi

Le densità sperimentali dei protoni di ^{16}O e ^{40}Ca sono state parametrizzate rispettivamente con una distribuzione di Fermi a due parametri

$$n_{Fermi}(r) = \frac{n_0}{1 + e^{\frac{r-c}{z}}} \quad (3.3.3)$$

e a tre parametri

$$n_{Fermi}(r) = \frac{n_0(1 + \frac{wr^2}{c^2})}{1 + e^{\frac{r-c}{z}}} \quad (3.3.4)$$

I valori di c , z e w sono diversi per ogni nucleo considerato e sono stati presi dall'articolo di De Vries [VJV87]. ρ_0 è un fattore che normalizza la densità di protoni del modello di Fermi alla carica totale del nucleo Ze .

Fit di SOG

Un altro tipo di parametrizzazione utilizzato nel presente elaborato (per il nucleo di ^{208}Pb) è la *Sum of Gaussian* SOG, ovvero somma di funzioni gaussiane. Questo tipo di parametrizzazione è particolarmente conveniente in quanto, in riferimento a quanto detto nell'introduzione, il potenziale nucleare efficace può essere approssimato a quello di un oscillatore armonico, per il quale è nota la forma analitica delle soluzioni che presentano un andamento gaussiano. Anche le densità di nucleoni manterranno allora questo andamento (vedi equazione (3.3.1)).

$$\psi(r) \propto e^{-\frac{r^2}{a^2}}$$

La larghezza γ gaussiane è scelta in modo da essere uguale alla più piccola larghezza dei picchi nelle funzioni d'onda radiali calcolate con il metodo di Hartree-Fock. Un vantaggio nell'uso delle gaussiane consiste nel fatto che le densità di nucleoni a diversi valori di r sono altamente disaccoppiate a causa della rapida decrescita

delle code delle funzioni gaussiane. Si usa la seguente definizione

$$n(r) = \frac{1}{2\pi^{2/3}\gamma^3} \sum_i A_i \left\{ e^{-\left(\frac{r-R_i}{\gamma}\right)^2} + e^{-\left(\frac{r+R_i}{\gamma}\right)^2} \right\} \quad (3.3.5)$$

dove i coefficienti A_i sono dati da

$$A_i = \frac{ZQ_i}{1 + 2\frac{R_i^2}{\gamma^2}} \quad (3.3.6)$$

Utilizzando questa definizione, i valori di Q_i indicano la frazione di carica contenuta nella i -esima gaussiana, normalizzati in modo che

$$\sum_i Q_i = 1 \quad (3.3.7)$$

L'articolo [VJV87] contiene tali valori per un gran numero di nuclei. La larghezza γ delle gaussiane è data da

$$\gamma = \left(\frac{2}{3} \langle r^2 \rangle \right)^{1/2} \quad (3.3.8)$$

Anche i valori del raggio quadratico medio sono stati presi dall'articolo di De Vries [VJV87].

3.3.3 Simulazioni di esperimenti di scattering

Vogliamo ora utilizzare delle densità che derivino, anziché da parametrizzazioni, da esperimenti di scattering reali, in modo da essere in una situazione di indipendenza da qualunque modello per le densità di nucleoni. Per fare questo è necessario, come spiegato nella sezione 1.3, partire da sezioni d'urto differenziali, passare ai fattori di forma e successivamente ottenere le densità sperimentali. Tuttavia i dati disponibili in letteratura sono troppo limitati per poter ottenere risultati accettabili. A titolo di esempio, la **Figura 3.5** mostra la densità sperimentale ottenuta in questo modo per il Piombo 208 (con esperimenti di scattering elettronico a 502 MeV) e la relativa densità SOG. Come si può vedere, le due densità non solo differiscono in modo evidente, ma per quanto riguarda quella sperimentale non sono ottenibili valori di r piccoli. Questo è dovuto al fatto che la trasformata di

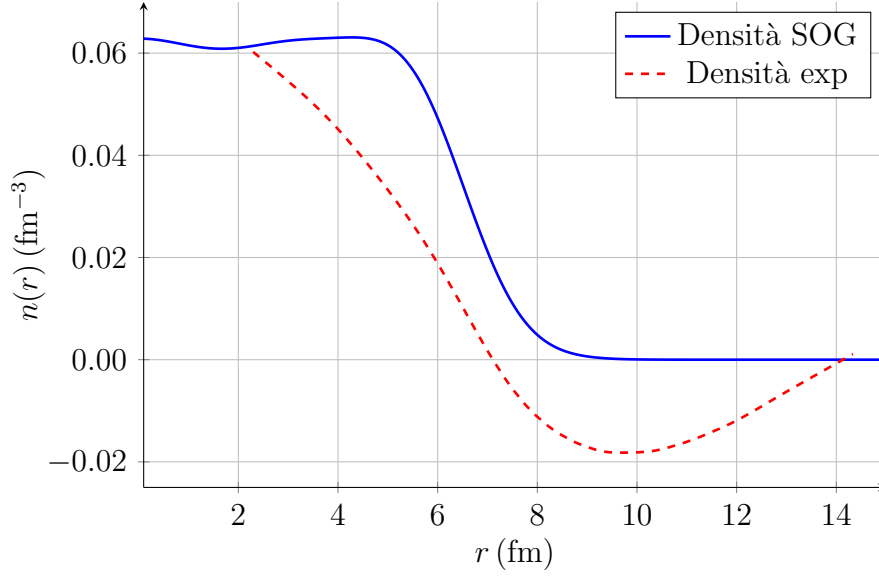


Figura 3.5: Confronto tra la densità parametrizzata SOG e la densità derivante da esperimenti di scattering per il nucleo di Piombo 208

Fourier (2.3.5) dipende da un integrale rispetto a q che va da zero a infinito, mentre l'energia dell'elettrone incidente è troppo piccola per poter produrre valori di q abbastanza alti ($q = \frac{2E}{\hbar c} \sin \theta/2$). Un altro grosso problema che mostra la figura sono i valori negativi non fisici che la densità assume per alcuni valori di r . Queste oscillazioni attorno lo zero non sono eliminabili e dipendono ancora una volta dal range limitato di valori di q , che fanno sì che il termine sinusoidale nell'integrand della equazione (2.3.5) non venga completamente soppresso dal fattore di forma. Tuttavia questo effetto può essere ridotto di molto utilizzando energie di scattering più alte. Nel prossimo capitolo è spiegato nel dettaglio come, ma anticipiamo qui che saranno necessarie energie di scattering di almeno 1 GeV. Vediamo ora però come superare il problema dell'insufficienza dei dati sperimentali disponibili.

Per avere a disposizione una più ampia gamma di dati sono state allora utilizzate simulazioni al computer per produrre delle sezioni d'urto sperimentali. Questo procedimento ha il forte vantaggio di permetterci di capire a quali energie ed angoli di scattering andranno fatti in futuro esperimenti di scattering per ottenere dei risultati accettabili.

Il metodo utilizzato per ricavare le DCS, spiegato nell'articolo [Roc+08], uti-

lizza una densità derivante da modello G2. Questo modello è stato costruito con una Lagrangiana adronica consistente con le simmetrie della cromodinamica quantistica. G2 descrive la struttura elettromagnetica a bassa energia del nucleone utilizzando la predominanza di bosoni-vettori e fornisce direttamente la densità di carica del nucleo. La figura mostra la differenza tra le sezioni d'urto differenziali sperimentali e quelle determinate a partire da densità G2, ottenute tramite il procedimento descritto dall'articolo [Roc+08]. Come si può vedere, il modello G2 riproduce molto fedelmente i valori delle sezioni d'urto sperimentali per angoli di scattering bassi, mentre inizia a discostarsi, rimanendo comunque con valori ragionevoli, per valori di θ maggiori. Inoltre si può notare come ci sia un ottimo accordo tra il modello G2 e i dati sperimentali per nuclei leggeri, mentre per i nuclei pesanti la differenza tra le due DCS si manifesta in modo più evidente.

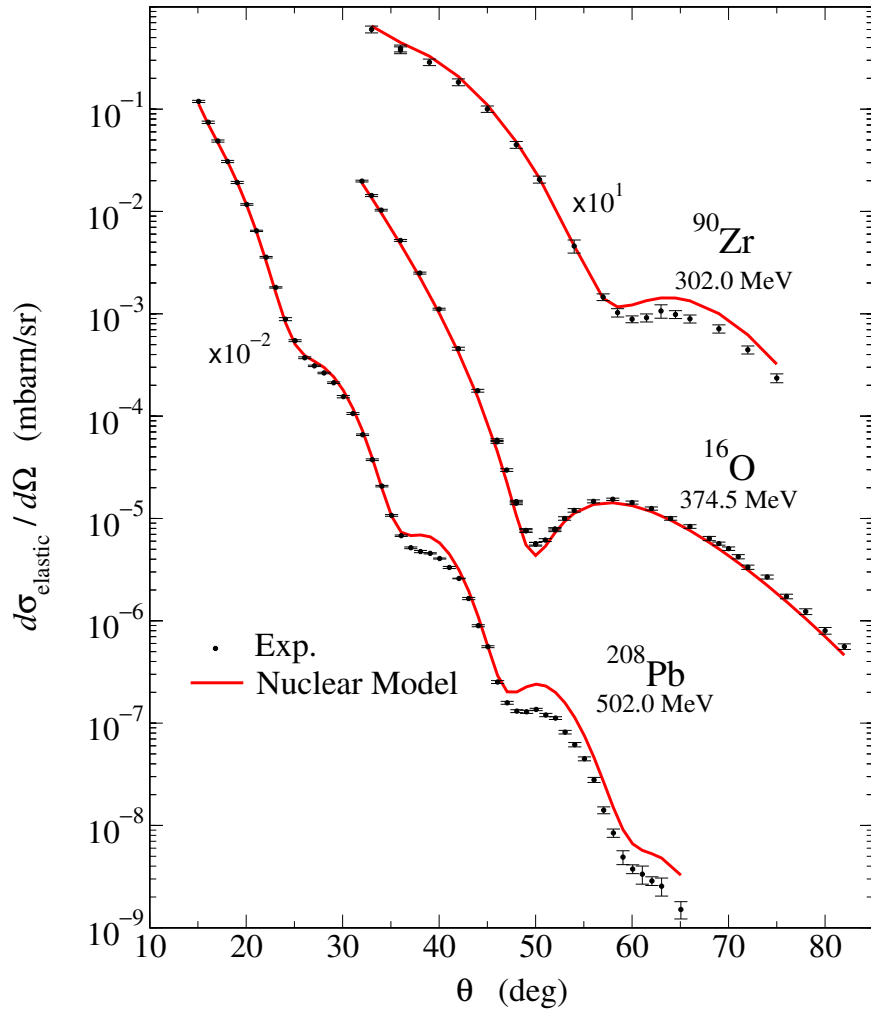


Figura 3.6: Confronto da DCS sperimentali e il modello G2 per alcuni nuclei

CAPITOLO 4

PROCEDURA COMPUTAZIONALE

Illustriamo ora nel dettaglio il procedimento che è stato utilizzato per risolvere il problema di Kohn-Sham inverso. Tutto il codice è stato implementato in C++ e per alcune funzioni è stata utilizzata la libreria ROOT [root18]. Per la verifica del funzionamento numerico degli algoritmi utilizzati per la trasformata di Fourier e per le equazioni differenziali si è utilizzato *Mathematica*¹ [math12].

4.1 Autovalori e autofunzioni dell'energia

4.1.1 Algoritmo di shooting

Per la soluzione di ogni equazione differenziale (3.1.5) nel codice è stato implementato un algoritmo di Runge-Kutta al quarto ordine (con una precisione di $O(h^4)$), mentre per le integrazioni si è fatto uso del metodo dei trapezoidi, che dà una precisione di $O(h^2)$, dove h è il passo utilizzato. Per la normalizzazione di funzioni derivanti da trasformate di Fourier, poiché i dati risultanti non sono equispaziati, si è utilizzato nel calcolo degli integrali un passo non fissato e per questo l'accuratezza del metodo ha una precisione inferiore rispetto a $O(h^2)$. Nella presente discussione si è utilizzato $h = 0.01$ fm per risolvere le equazioni differenziali e

¹che utilizza dei metodi per il calcolo degli integrali e delle equazioni differenziali che non necessitano di immagazzinare dati all'interno di variabili definite dall'utente e quindi riduce di molto la possibilità di errori numerici

$h = 0.1$ fm per tutti i procedimenti che coinvolgono l'algoritmo di inversione. Per valutare gli autovalori dell'energia e le relative autofunzioni è stato utilizzato un *algoritmo di shooting*, che ha il seguente funzionamento:

- inizialmente si scelgono due differenti autovalori dell'energia (E_1 and E_2), che vengono inseriti nell'equazione (3.1.5) per ottenere due differenti autofunzioni;
- si verifica che queste autofunzioni siano discordi in r_{max} . Se questo non accade, si sceglie un intervallo di energie differente;
- si calcolano le autofunzioni associate agli autovalori $E_t = \frac{E_1 + E_2}{2}$ e si valuta il suo segno in r_{max} ;
- si sostituisce quindi E_t con l'autovalore la cui autofunzione è concorde a quella che ha autovalore E_t in r_{max} .

Gli autovalori sono stati cercati a partire da -50 MeV, in modo che la ricerca copra completamente il range di energie per tutti i nuclei indagati (i più bassi trovati sono a circa -40 MeV per i neutroni del Piombo 208). A partire da questo valore, gli autovalori dell'energia sono stati indagati a intervalli di 0.1 MeV. Come condizione di convergenza si è scelto per l'equazione (3.1.8) $\varepsilon = 10^{-6}$ e $r_{max} = 15$ fm, che è almeno due volte il raggio nucleare per i nuclei considerati (quello maggiore è del ^{208}Pb con $R_N \approx 7.1$ fm). Poiché lo scopo è quello di analizzare stati legati, sono stati cercati solo autovalori dell'energia negativi. I dati sono stati raccolti nella **Tabella 3.1** e sono ottenuti da un calcolo di test fatto assumendo un potenziale esterno di Wood-Saxon e coulombiano.

Contestualmente alla ricerca degli autovalori sono state determinate le autofunzioni radiali dell'energia. Ogni autofunzione è stata quindi normalizzata secondo la seguente equazione:

$$\int d\mathbf{r} \Psi_i^*(\mathbf{r})\Psi_i(\mathbf{r}) = 4\pi \int dr r^2 \frac{u_i^*(r)}{r} \frac{u_i(r)}{r} \int Y_i^*(\mathbf{r})Y_i(\mathbf{r}) = \int dr u_i^*(r)u_i(r) = 1 \quad (4.1.1)$$

dove il termine $Y(\mathbf{r}) = \Theta(\theta)\Phi(\phi)$ rappresenta le *armoniche sferiche*.

Una volta determinate le autofunzioni, passare alle densità teoriche è immediato attraverso l'equazione (3.3.1).

4.2 Densità sperimentali

4.2.1 Dalle DCS ai fattori di forma

Il passaggio dalle sezioni d'urto differenziali al fattore di forma è stato fatto attraverso l'equazione (2.3.1), come già motivato.

Il problema che si pone ora è quello di determinare un'espressione di $F(q)$ a partire da $|F(q)|^2$. Ovviamente questo passaggio non può essere svolto analiticamente in quanto, avendo unicamente le informazioni sul quadrato di una funzione, non è possibile risalire univocamente a questa, a causa della perdita di informazioni sul segno della funzione derivante dall'operazione di elevamento al quadrato.

La prima osservazione che ci può aiutare nell'affrontare questo problema è che per $q = 0$ si ha $F(q) = 1$. Inoltre sappiamo che ogni volta che si ha una discontinuità della derivata prima del fattore di forma, in corrispondenza di quei punti si avrà una variazione del segno di $F(q)$. Se riusciamo quindi ad individuare con precisione i punti di inversione di segno, possiamo determinare una forma di $F(q)$, sapendo che tale funzione dovrà partire da valori positivi (iniziando da 1), per poi essere ribaltata simmetricamente rispetto all'asse delle ascisse in corrispondenza di ognuno di questi punti.

Consideriamo ora la **Figura 4.1** per chiarire più nel dettaglio il procedimento. Un problema che potrebbe essere apparentemente insito in questo procedimento è di dipendere dalla scelta dei punti di inversione, che è arbitraria e manuale. Mostriamo ora però che l'incertezza nella scelta di tale punto è talmente ridotta da essere del tutto trascurabile e al di sotto di quella dovuta all'errore sperimentale delle DCS.

In figura sono stati evidenziati tre tipi differenti di intervalli:

- quelli verdi, con un'incertezza di 0.2 fm^{-1} . In corrispondenza di questi punti si ha una variazione del segno della derivata prima del fattore di forma, che passa dall'essere negativa a positiva, perciò l'intervallo di incertezza del punto di inversione è abbastanza ridotto;
- quelli arancioni, con un'incertezza di 0.3 fm^{-1} . Qui si ha un passaggio della derivata da negativa ad un valore all'incirca nullo;

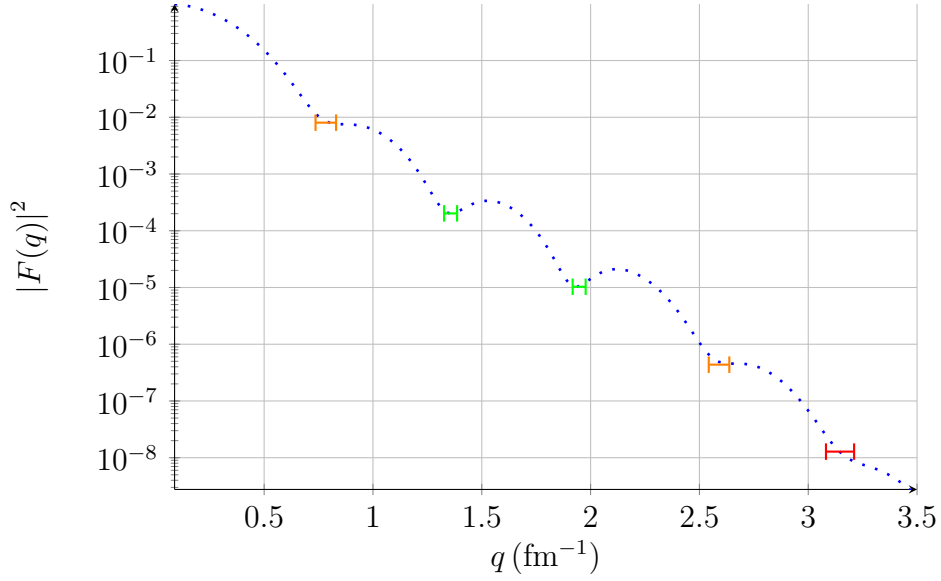


Figura 4.1: Fattore di forma del ^{132}Sn , con evidenziati gli intervalli di incertezza per i punti di cambiamento di segno

- quelli rossi, con un'incertezza di 0.4 fm^{-1} . Sono quelli più complicati da gestire in quanto la derivata rimane negativa e la discontinuità è difficile da individuare;

Il punto di cambiamento di segno è stato scelto sempre come il punto centrale di ogni intervallo determinato. Per mostrare però come sia poco influente sul risultato finale la scelta del punto di inversione nell'intervallo individuato, rappresentiamo in **Figura 4.2** le densità ottenute dal processo di inversione scegliendo come punti di variazione del segno gli estremi sinistro e destro degli intervalli di incertezza. Come si può vedere, la differenza tra le due densità ottenute è minima ed è visibile ad occhio solo nei punti iniziali, per valori di r inferiori al fermi. Questo è dovuto al fatto che il numero di punti sperimentali disponibili per il fattore di forma sono pochi, perciò la scelta del punto di inversione nell'intervallo di incertezza corrisponde al ribaltamento di al più due punti.

Siamo quindi giunti ad avere una stima per il fattore di forma $F(q)$. Vediamo ora come passare da questo alle densità sperimentali.

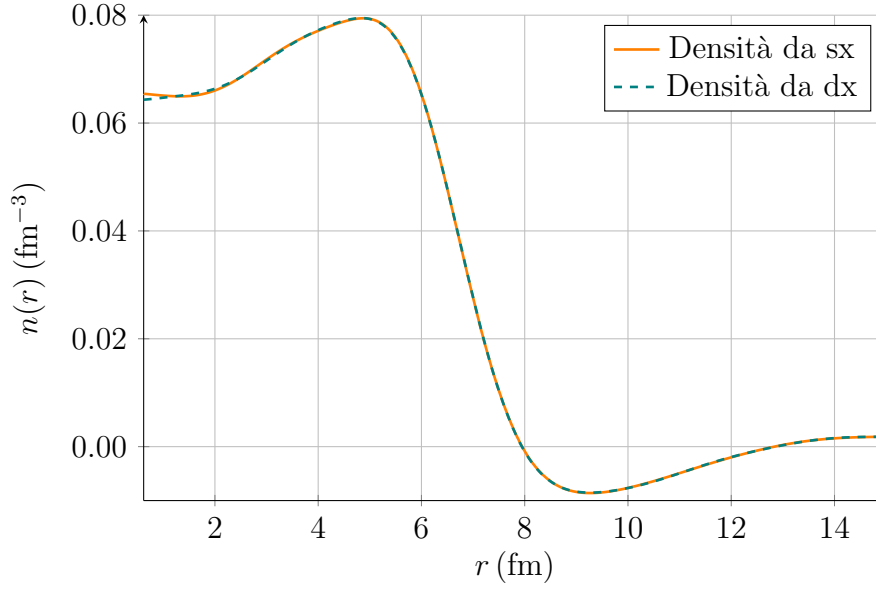


Figura 4.2: Confronto tra le densità di protoni ottenute scegliendo come punti di cambiamento di segno gli estremi degli intervalli di incertezza

4.2.2 Dai fattori di forma alle densità

Il passaggio di per sé è semplice: è sufficiente fare la trasformata di Fourier (2.3.4) per ottenere le densità sperimentali. Tuttavia, come abbiamo già anticipato, il piccolo range di valori di q , coperto dai dati che abbiamo, fa sì che la densità ottenuta abbia oscillazioni non controllate intorno all'origine. Queste oscillazioni fanno sì sia che le densità in alcuni punti si annullino (e questo causa alcuni problemi numerici per l'algoritmo di inversione), sia che le densità assumano in alcuni punti valori negativi. A causa di questi valori, le densità non possono essere normalizzate correttamente.

Vediamo quindi come risolvere questo problema per i vari nuclei studiati. Per quanto riguarda i nuclei leggeri di ^{16}O e ^{40}Ca , le oscillazioni intorno all'origine sono talmente piccole da non dare particolari problemi di normalizzazione (**Figura 4.3**). Per nuclei più pesanti, quali il Piombo 208, le oscillazioni iniziano ed essere complicate da gestire in quanto maggiori, perciò si è deciso di normalizzare ciascuna densità in due modi diversi in base al valore di r nel seguente modo:

- innanzitutto si individua il primo punto in cui la densità si annulla;

- successivamente si calcola l'integrale della densità SOG normalizzata fino al $\tilde{r}$ determinato in precedenza;
- infine si normalizza la densità sperimentale al valore calcolato al secondo punto fino a $\tilde{r}$, mentre il resto della funzione è normalizzato alla frazione di protoni restante.

I risultati di questo procedimento sono raffigurati in **Figura 4.4**.

Per lo Stagno 132, non essendo disponibili i dati di densità parametrizzate SOG, si è dovuto ricorrere ad una procedura meno fine, attribuendo il 99% del numero di protoni alla prima parte della funzione (fino a $\tilde{r}$).

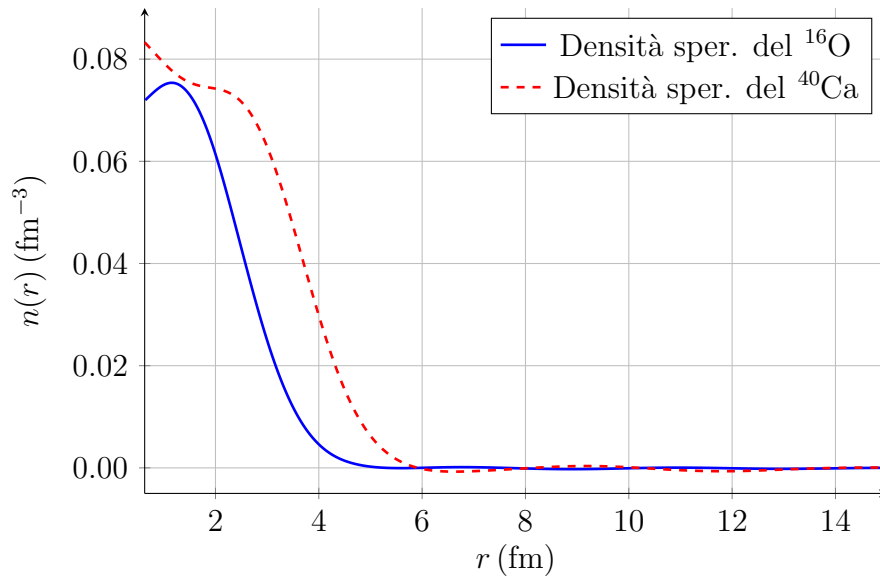


Figura 4.3: Densità sperimentali per i protoni del ^{16}O e del ^{40}Ca

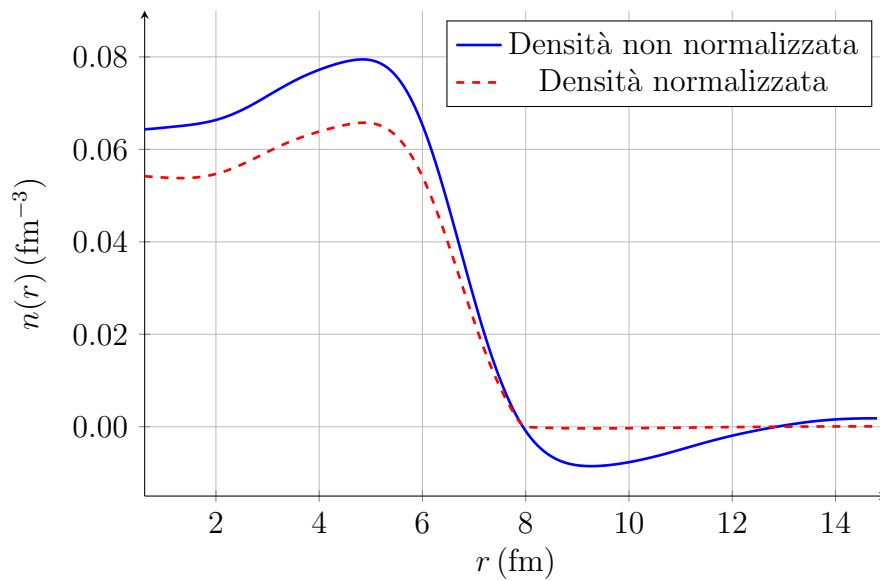


Figura 4.4: Densità sperimentali per i protoni ^{208}Pb , con e senza la normalizzazione separata

4.3 Dalle densità ai potenziali efficaci

4.3.1 Interpolazione

L'algoritmo così implementato fornisce dati per la densità non equispaziati, con una concentrazione maggiore di punti per r piccoli. Poiché l'algoritmo di inversione può funzionare solo a partire da dati equispaziati (il metodo di Runge-Kutta non può funzionare altrimenti), è stata fatta un'interpolazione dei dati ottenuti, dai quali sono stati estratti punti equispaziati. Si è allora utilizzato un algoritmo di Spline a cinque punti, implementato da una classe della libreria ROOT di C++, per interpolare i punti ottenuti ed estrapolare da questi quelli equidistanti. Al fine di testare il funzionamento dell'algoritmo di Spline e controllare che l'interpolazione non modifichi significativamente il risultato del processo di inversione, è stata svolta la seguente verifica:

- innanzitutto è stato calcolato il potenziale risultante dal processo di inversione di una densità parametrizzata Fermi (ad esempio per il ^{40}Ca);
- successivamente sono stati generati casualmente, lungo la densità di Fermi, vari punti che sono quindi non equispaziati;
- questi punti sono stati quindi interpolati con l'algoritmo di Spline già menzionato, e dalla funzione risultante sono stati estrapolati i dati equispaziati da inserire nell'algoritmo di inversione;
- infine è stato determinato il potenziale risultante.

Come si può vedere dalla **Figura 4.5**, il metodo di interpolazione utilizzato non mostra variazioni significative per il potenziale finale.

4.3.2 Algoritmo di inversione

Abbiamo quindi ora tutti gli strumenti necessari per affrontare il problema inverso ed applicare le equazioni ricavate teoricamente (3.2.3).

L'algoritmo così implementato non è tuttavia abbastanza rigido per riuscire a controllare eventuali oscillazioni non desiderate derivanti da problemi computazionali. Per non intralciare il processo di convergenza sono stati quindi utilizzati

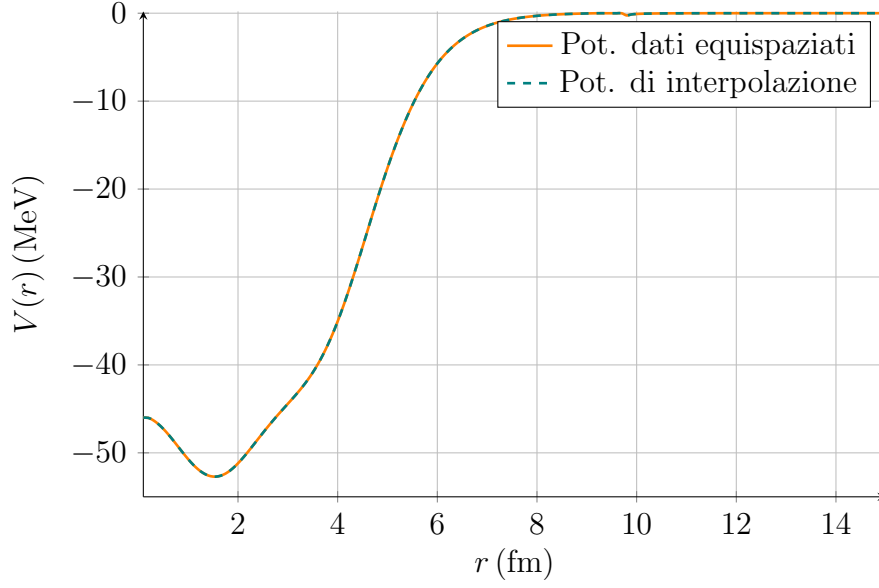


Figura 4.5: Confronto tra i potenziali nucleare del ^{40}Ca derivanti da parametrizzazione di Fermi per dati equispaziati e non equispaziati

due accorgimenti. Il primo e principale è stato quello di utilizzare, invece che le equazioni (3.2.3) (utilizzate in precedenza da [Cue17] e [Por16] nell'affrontare questo problema), una loro versione modificata, che porta alla convergenza molto più lentamente ma anche in maniera più controllata. Questo metodo, allo stesso modo di come vengono implementati gli algoritmi per risolvere le equazioni di Hartree-Fock, costruisce il nuovo potenziale sommando con due pesi diversi il potenziale ottenuto dalle equazioni (3.2.3) e quello derivante dall'iterazione precedente, come spiegato dalla seguente equazione:

$$V^{k+1}(\mathbf{r}) = p_1 V^{k+1}(\mathbf{r}) + p_2 V^k(\mathbf{r}) \quad (4.3.1)$$

dove il segno '=' deve essere inteso in senso informatico, come simbolo che associa la quantità presente al secondo membro con quella presente al primo. La scelta dei pesi è complicata, in quanto, se p_1 è troppo piccolo, l'algoritmo non riesce a modificare il potenziale di input e si riottiene il potenziale di Wood-Saxon inserito alla prima iterazione, mentre, se p_1 è troppo grande, l'algoritmo può non convergere. Si è trovato tentativamente che $p_1 = 0.05$ e $p_2 = 0.95$ permettono di arrivare

a convergenza per tutti i nuclei studiati.

```
do{
    if(V[r] <= 0) {
        k = 2 - (dens_teo[r]/dens_spe[r]);
        (k < 1-gamma || k > 1+gamma) k = 1;
    }

    if(V[r] > 0) {
        k = (dens_teo[r]/dens_spe[r]);
        (k < 1-gamma || k > 1+gamma) k = 1;
    }

}while(dens_teo[r] - dens_spe[r]) < 0)

V[r] = 0.05*k*V[r] + 0.95*V[r];
```

Figura 4.6: Pseudocodice in C++ per il metodo iterativo. Per semplicità non è stata esplicitata l'iterazione dell'algoritmo su r

Il secondo metodo utilizzato per facilitare la convergenza dall'algoritmo è stato implementare un controllo sulla variazione del potenziale tra due iterazioni consecutive:

$$\begin{cases} 1 - \gamma < \alpha \left(2 - \frac{n^k(r)}{\tilde{n}(r)} \right) < 1 + \gamma & V(r) \leq 0 \\ 1 - \gamma < \alpha \frac{n^k(r)}{\tilde{n}(r)} < 1 + \gamma & V(r) > 0 \end{cases} \quad (4.3.2)$$

Dove α è un prefattore e γ può variare molto in base al nucleo studiato, ma è di norma stato scelto tra 0.20 e 0.50. A differenza del primo accorgimento, questo controllo del codice è stato applicato solo ad alcuni punti delle funzioni che presentavano forti instabilità a causa del comportamento oscillatorio lungo lo zero delle densità sperimentali utilizzate.

Per quanto riguarda la convergenza dell'algoritmo, questa è stata solitamente raggiunta dopo un numero di iterazioni compreso tra 20 e 50, ma la sua velocità è strettamente dipendente dalla densità sperimentale scelta. Un rappresentazione

grafica della velocità di convergenza della procedura di inversione per il ^{208}Pb è data dalla (**Figura 4.7**).

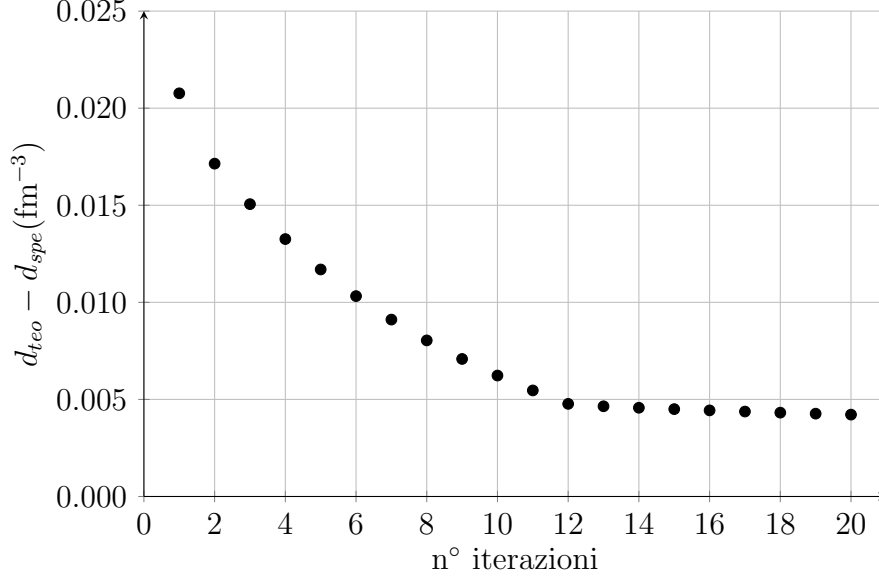


Figura 4.7: Velocità di convergenza dell'algoritmo di inversione per il Piombo 208. L'asse delle ordinate rappresenta la massima differenza tra la densità sperimentale e quella teorica determinata ad ogni iterazione dal potenziale calcolato.

Divergenza del potenziale SOG

Per quanto riguarda la parametrizzazione SOG delle densità fatta per il Piombo 208, il potenziale risultante dal processo di inversione risulta divergere per r grandi. Questo è dovuto al fatto che le gaussiane sono autofunzioni soluzioni di una buca di potenziale armonica, per la quale $\lim_{r \rightarrow \infty} V(r) = +\infty$. Per controllare tutte queste oscillazioni si è scelto allora di imporre lungo tutte le code gaussiane piccole oscillazioni attraverso l'equazione (4.3.2), utilizzando valori di γ piccoli. Poiché il potenziale di prova inserito è quello di Wood-Saxon, questa condizione equivale ad imporre un andamento del potenziale nucleare molto vicino a quello di Wood-Saxon per r grandi.

A scopo di confronto, nella **Figura 4.8** sono stati sovrapposti il potenziale risultante dall'inversione della densità SOG e il potenziale di Wood-Saxon per il

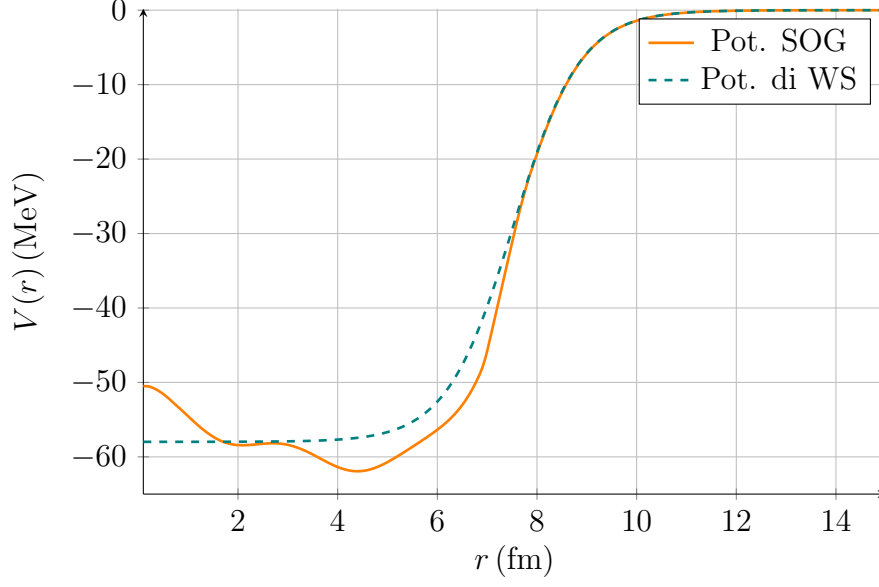


Figura 4.8: Confronto tra il potenziale SOG del ^{208}Pb e quello relativo di Wood-Saxon

Piombo 208. Come anticipato, l'andamento dei due potenziali per r grandi è simile. In particolare, a partire da $r = 8$ fm sembra graficamente identico, rimanendo però il potenziale SOG leggermente al di sotto.

4.4 Confronto dei fattori di forma

A partire dalle densità parametrizzate Fermi e SOG, abbiamo operato una trasformata di Fourier inversa rispetto alla (2.3.4), per confrontare i fattori di forma così ottenuti con quelli sperimentali. L'equazione utilizzata si ottiene a partire dalla trasformata di Fourier della densità

$$F(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\Omega} d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} n(\mathbf{r}) \quad (4.4.1)$$

Questa equazione può essere semplificata, in modo analogo a quanto fatto per la sua forma inversa in appendice A. Si giunge quindi alla seguente equazione

$$F(q) = 4\pi \int_0^\infty dr q \frac{\sin qr}{r} n(r) \quad (4.4.2)$$

Questo procedimento è stato svolto per tutti i nuclei eccetto che per il ^{132}Sn , per il quale non sono disponibili dall'articolo [VJV87] dati per parametrizzazioni Fermi o SOG. A scopo di confronto sono stati rappresentati in **Figura 4.9** i fattori di forma sperimentale e quello ottenuto per inversione della densità SOG per il Piombo 208. Come si può vedere, i due grafici hanno un ottimo accordo per basso

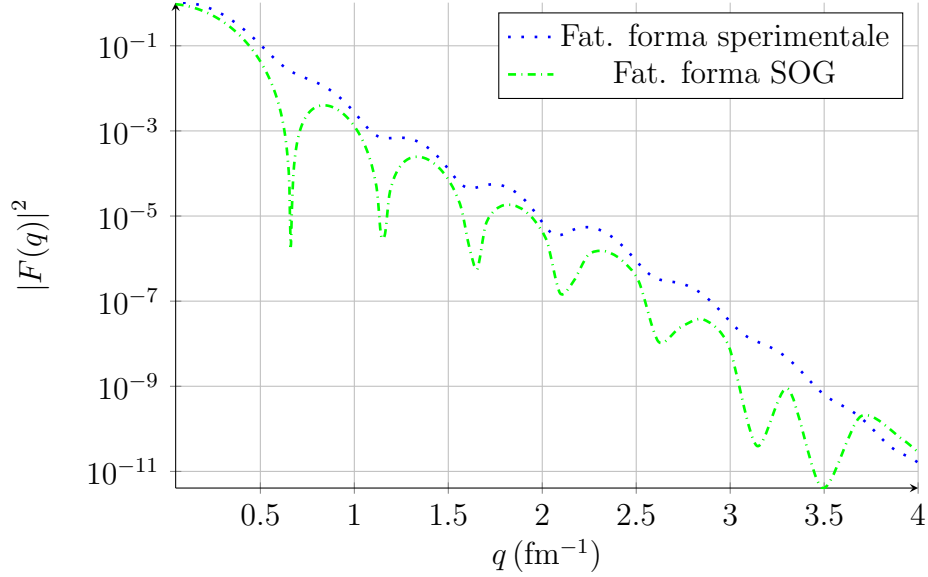


Figura 4.9: Fattore di forma sperimentale e di inversione della densità SOG del ^{208}Pb

momento trasferito, mentre per q maggiori la differenza inizia ed essere significativa. Ciò è probabilmente dovuto al fatto che nell'equazione (4.4.2) l'integranda è proporzionale a q , perciò i q bassi tendono ad annullare il termine sinusoidale che può far oscillare la funzione a causa del range limitato di r con cui è stato calcolato l'integrale. Le differenze sono anche dovute al fatto che la curva blu viene da un calcolo molto realistico (DWBA), mentre invece quella verde deriva da una trasformata di Fourier (equivale ad un calcolo in PWBA) .

Per quanto riguarda i nuclei più leggeri, la differenza tra i due fattori di forma inizia ad essere maggiore per alto momento trasferito. Si riportano nella **Figura 4.10** i fattori di forma per l'Ossigeno 16.

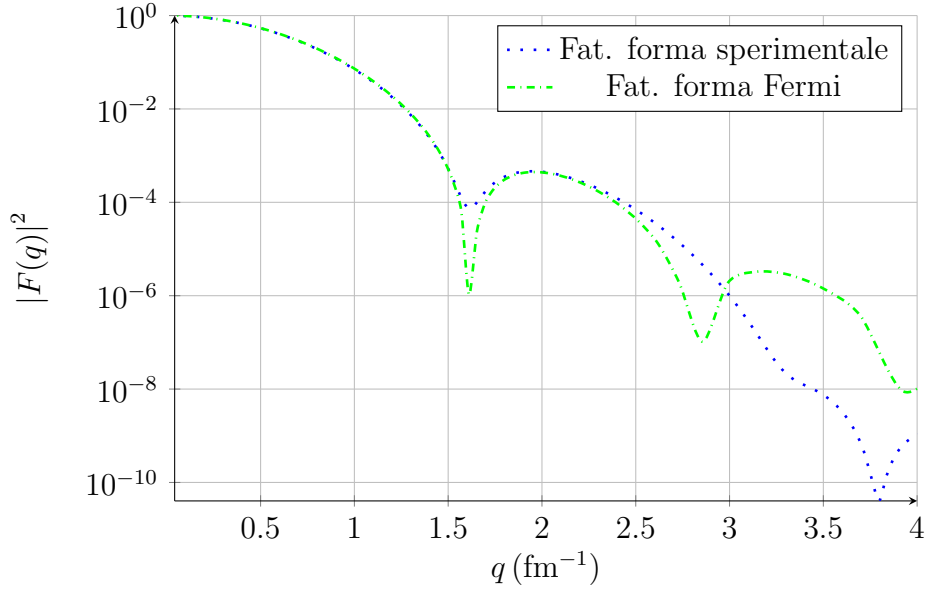


Figura 4.10: Fattore di forma sperimentale e di inversione della densità Fermi del ^{16}O

4.5 Densità di neutroni del ^{208}Pb

Finora abbiamo lavorato soltanto con protoni, in quanto abbiamo considerato dati derivanti da esperimenti di scattering elettronico che ci forniscono la densità di elettrica coulombiana del nucleo. Ci si può però chiedere se il processo di inversione fornisce buoni risultati anche per i neutroni.

La densità di neutroni non è ottenibile sperimentalmente con lo stesso procedimento utilizzato per i protoni, in quanto i neutroni non interagiscono tramite interazione coulombiana con gli elettroni.

Quanto fatto è stato allora utilizzare dei dati derivanti da parametrizzazione di SOG per i neutroni, presi dall'articolo [Zen+10]. Gli autori di questo articolo hanno svolto un esperimento di scattering utilizzando lo spettrometro 'Grand Raiden', che utilizza come particelle proiettile i protoni, con il quale sono stati ottenuti con una buona precisione le densità di nucleoni (protoni + neutroni) di alcuni isotopi pesanti del piombo. I dati relativi alla densità di neutroni sono stati derivati a partire dalla densità totale di nucleoni, dalla quale, conoscendo la densità di carica, è stata 'estratta' quella di neutroni ottimizzando un fit per una parametrizzazione

di tipo SOG. I dati sono stati quindi riassunti nella **Tabella 4.1**. Per semplicità,

i	$R_i(\text{fm})$	Q_i
1	0.1	0.005 354 9
2	0.7	0.010 603 8
3	1.6	0.020 871 5
4	2.1	0.009 611 7
5	2.7	0.076 718 9
6	3.5	0.063 953 0
7	4.2	0.132 436 8
8	5.1	0.248 449 5
9	6.0	0.346 753 3
10	6.6	0.027 119 9
11	7.6	0.058 113 0
12	8.7	0.000 013 7

Tabella 4.1: Parametri di SOG per i neutroni del ^{208}Pb

sia la larghezza del picco gaussiano ($\gamma = \frac{2}{3} 1.70$) che le posizioni R_i sono state assunte essere uguali a quelle derivanti dalla parametrizzazione SOG dei protoni prese da [VJV87]. Deve rimanere naturalmente valida la condizione $\sum_i Q_i = 1$.

Nell'articolo [Zen+10] è inoltre mostrato in Figura 5 l'accordo tra i fattori di forma derivanti dal fit utilizzato e i dati sperimentali, che è ottimo anche nelle regioni di alto momento trasferito ($\approx 3.5 \text{ fm}$).

La densità SOG risultante è stata rappresentata nella **Figura 4.11**, insieme alla densità teorica risultante dall'ultima iterazione dell'algoritmo di inversione. Il potenziale derivante dall'inversione è raffigurato nel prossimo capitolo, riguardante i risultati principali di tutto il lavoro svolto. Nello stesso capitolo si discutono le differenze tra le densità ottenute per i neutroni del ^{208}Pb .

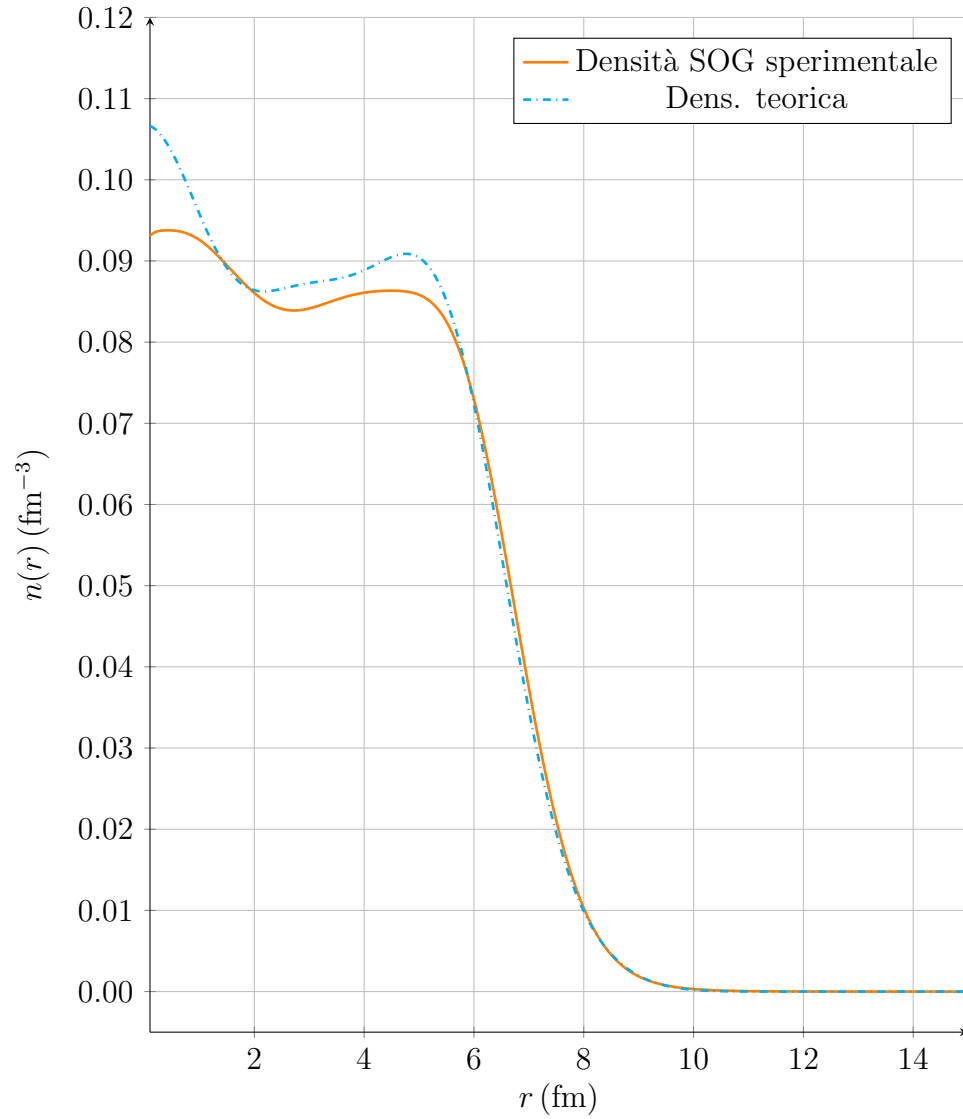


Figura 4.11: Densità SOG per i neutroni del ^{208}Pb

CAPITOLO 5

RISULTATI

In questo capitolo presentiamo i risultati relativi all'applicazione dell'algoritmo di inversione per i nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca , ^{132}Sn e ^{208}Pb . Abbiamo scelto questi nuclei in quanto hanno masse molto diverse e questo ci consente di confrontare i risultati anche in base a questa caratteristica. I nuclei sono stati scelti con un numero magico di protoni per permetterci di lavorare in simmetria sferica e di trascurare gli effetti di pairing.

Ricordiamo inoltre che le densità sperimentali sono state ottenute con un calcolo svolto in DWBA, mentre per le densità parametrizzate è stata usata la PWBA. Le densità determinate per i protoni sono in realtà le densità di carica del nucleo, tuttavia, come già motivato, la differenza tra queste è trascurabile per il nostro scopo.

Per i nuclei di ^{16}O e ^{40}Ca sono state inoltre considerate, a scopo di confronto, delle parametrizzazioni di Fermi per le densità, mentre per il ^{208}Pb è stata utilizzata una parametrizzazione SOG. Per il ^{132}Sn abbiamo dovuto utilizzare solo i dati di simulazioni sperimentali in quanto non erano in letteratura dati per alcun tipo di parametrizzazione.

I risultati sono presentati in quattro diversi pannelli per ogni nucleo nel modo seguente.

Sezioni d'urto sperimentali

Nel primo pannello è rappresentata la sezione d'urto differenziale (DCS) sperimentale, ottenuta a partire da simulazioni di esperimenti di scattering elastico di elettroni. I dati sono stati generati fino a 150° , ma sono rappresentati in figura solo fino a 45° in quanto più significativi. Anche i fattori di forma sono rappresentati solo nella regione di basso momento trasferito.

Fattori di forma

Nel secondo pannello sono presenti due tipi di dati:

- il *fattore di forma sperimentale*, ottenuto dalla DCS tramite l'equazione (2.3.1);
- il *fattore di forma di Fermi/SOG*, ottenuto dalla densità parametrizzata Fermi/SOG attraverso la trasformata di Fourier (4.4.2).

Densità

Il terzo pannello rappresenta tre diversi tipi di densità:

- la *densità di Fermi/SOG*, ottenuta dai dati presi da [VJV87];
- la *densità sperimentale*, ricavata tramite l'antitrasformata di Fourier (2.3.5) dei fattori di forma sperimentali;
- la *densità di Kohn-Sham*, derivante dall'algoritmo di inversione.

Potenziali

Infine sono ricavati i potenziali nucleari efficaci:

- il *potenziale di Fermi/SOG*, ottenuto attraverso le equazioni di inversione (3.2.3);
- il *potenziale di Kohn-Sham*, ottenuto allo stesso modo dalla densità sperimentale.

Per quanto riguarda i grafici dei potenziali bisogna tenere conto del fatto che, per dimensioni inferiori a circa 0.8 fm, siamo in un regime di grandezze che è caratteristico non più del nucleo ma del nucleone, perciò i grafici perdono significato fisico in quanto in questa regione il potenziale nucleare non è ben definito dall'approccio utilizzato.

Va inoltre sottolineato che nella risoluzione del problema inverso non è mai stato imposto alcun andamento asintotico né per le densità né per i potenziali.

OSSIGENO 16

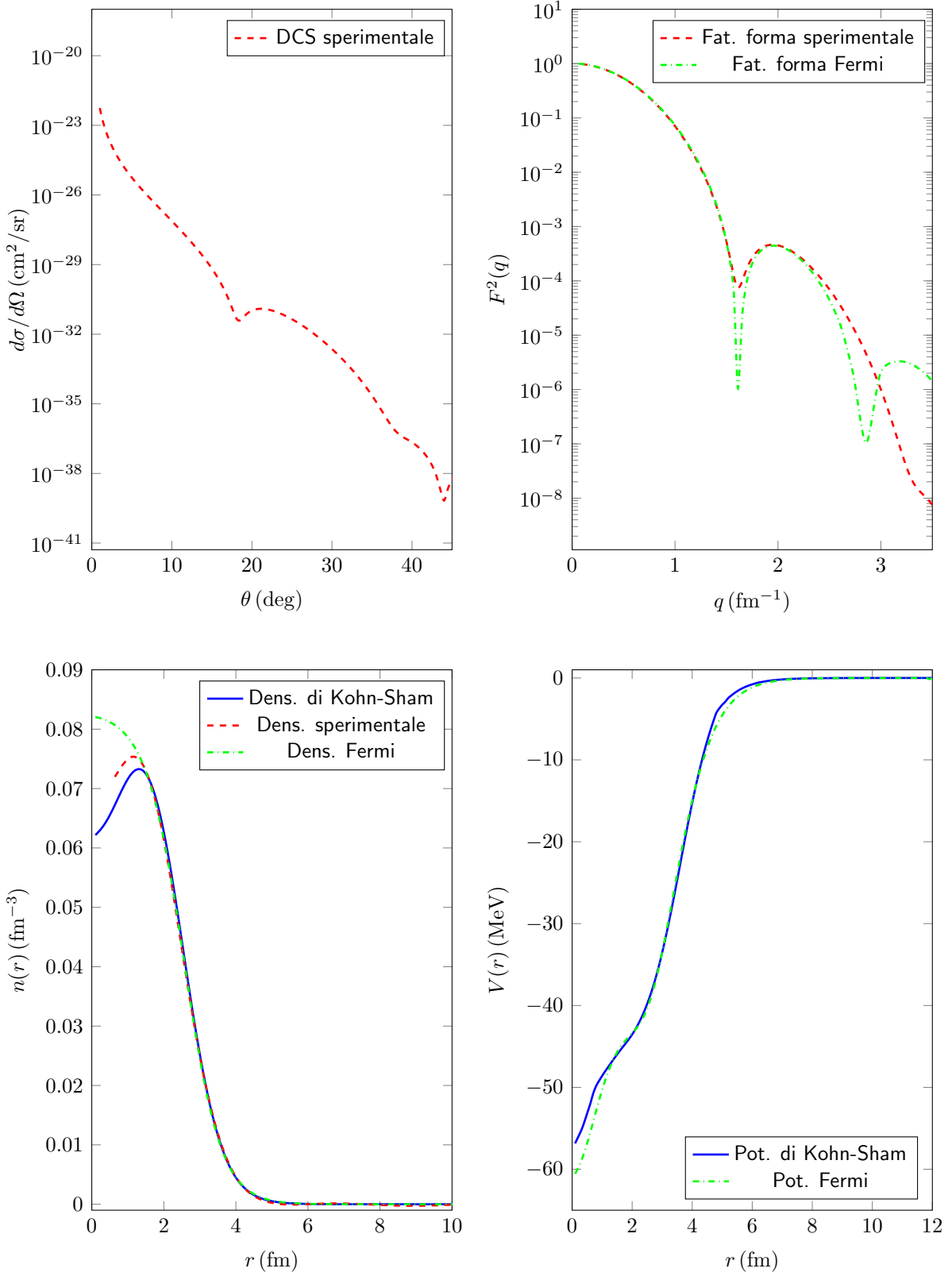


Figura 5.1: Sezione d'urto differenziale (in alto a destra), fattore di forma (in alto a sinistra), densità (in basso a sinistra) e potenziale nucleare (in basso a destra) dell'Ossigeno 16.

CALCIO 40

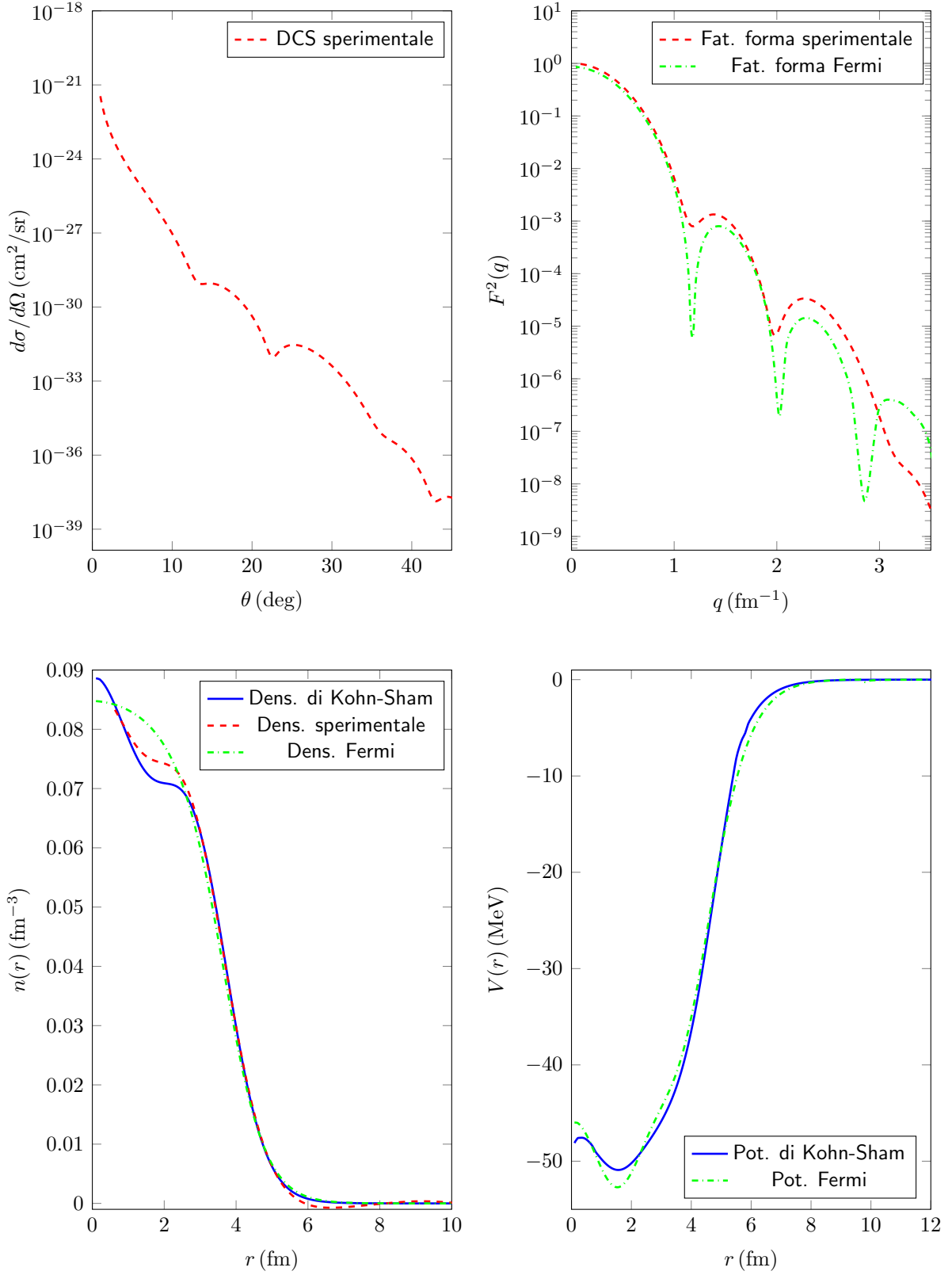


Figura 5.2: Sezione d'urto differenziale (in alto a destra), fattore di forma (in alto a sinistra), densità (in basso a sinistra) e potenziale nucleare (in basso a destra) del Calcio 40.

STAGNO 132

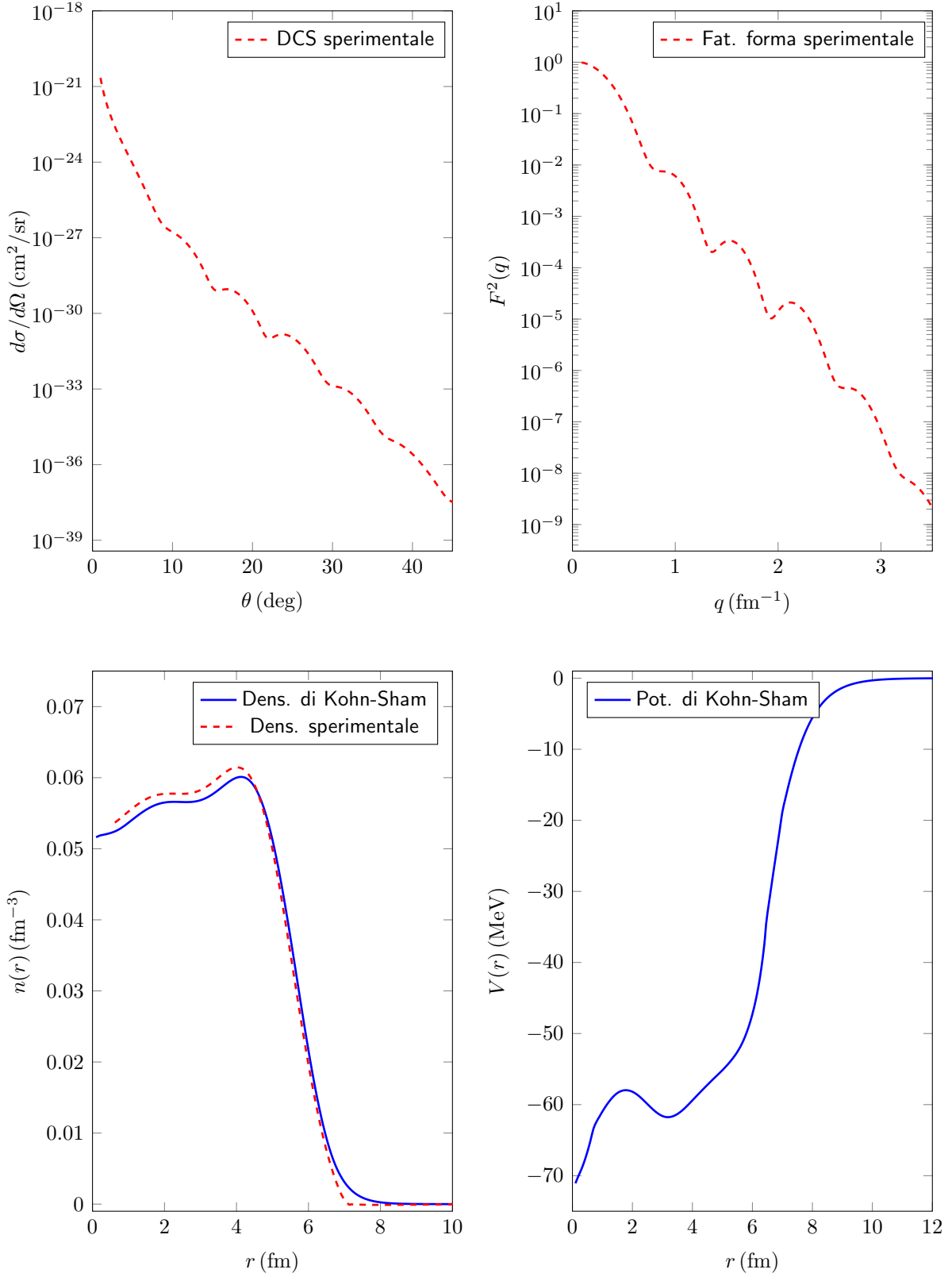


Figura 5.3: Sezione d'urto differenziale (in alto a destra), fattore di forma (in alto a sinistra), densità (in basso a sinistra) e potenziale nucleare (in basso a destra) dello Stagno 132.

PIOMBO 208 - PROTONI

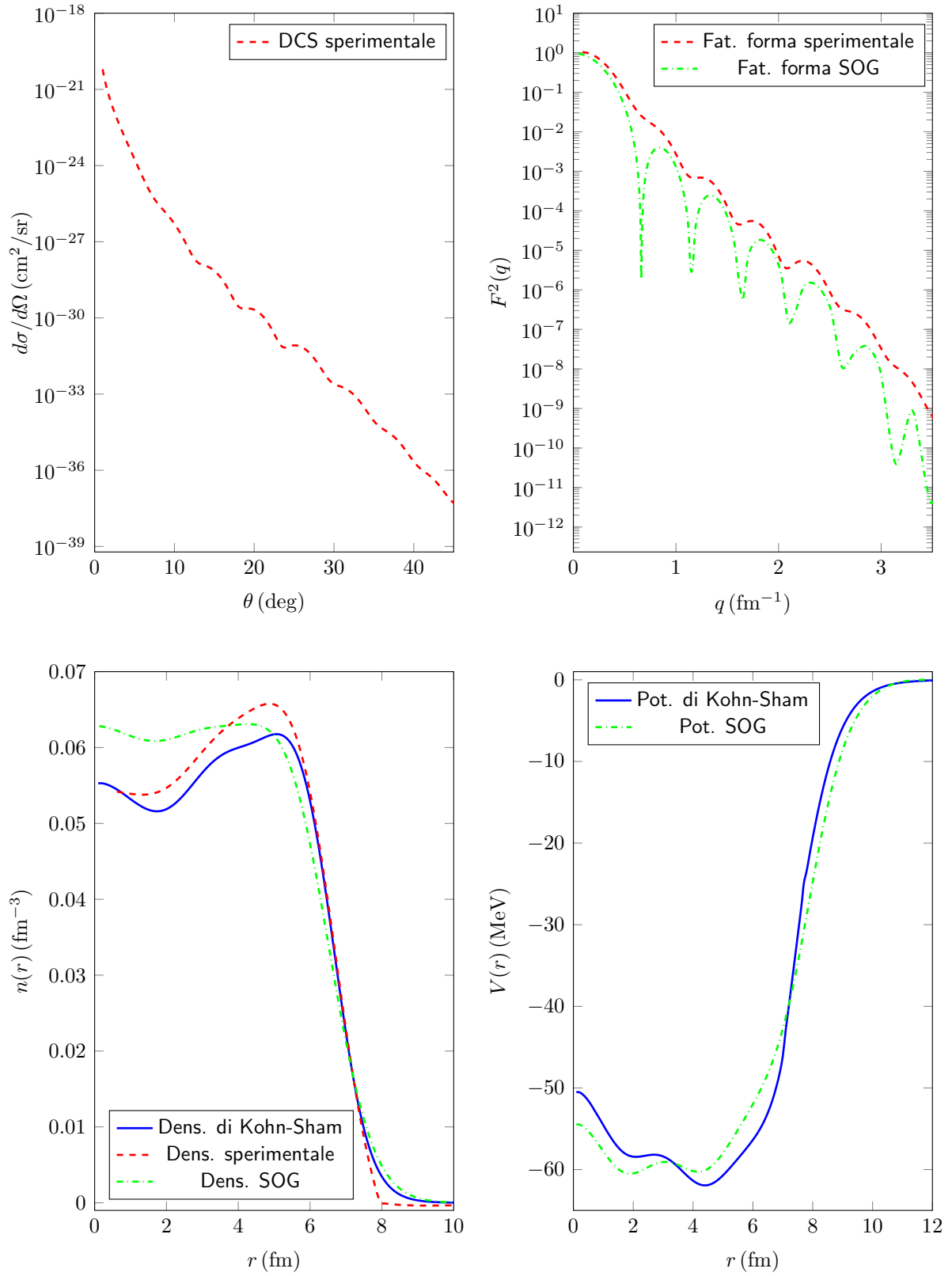


Figura 5.4: Sezione d'urto differenziale (in alto a destra), fattore di forma (in alto a sinistra), densità (in basso a sinistra) e potenziale nucleare (in basso a destra) dei protoni del Piombo 208.

PIOMBO 208 - NEUTRONI

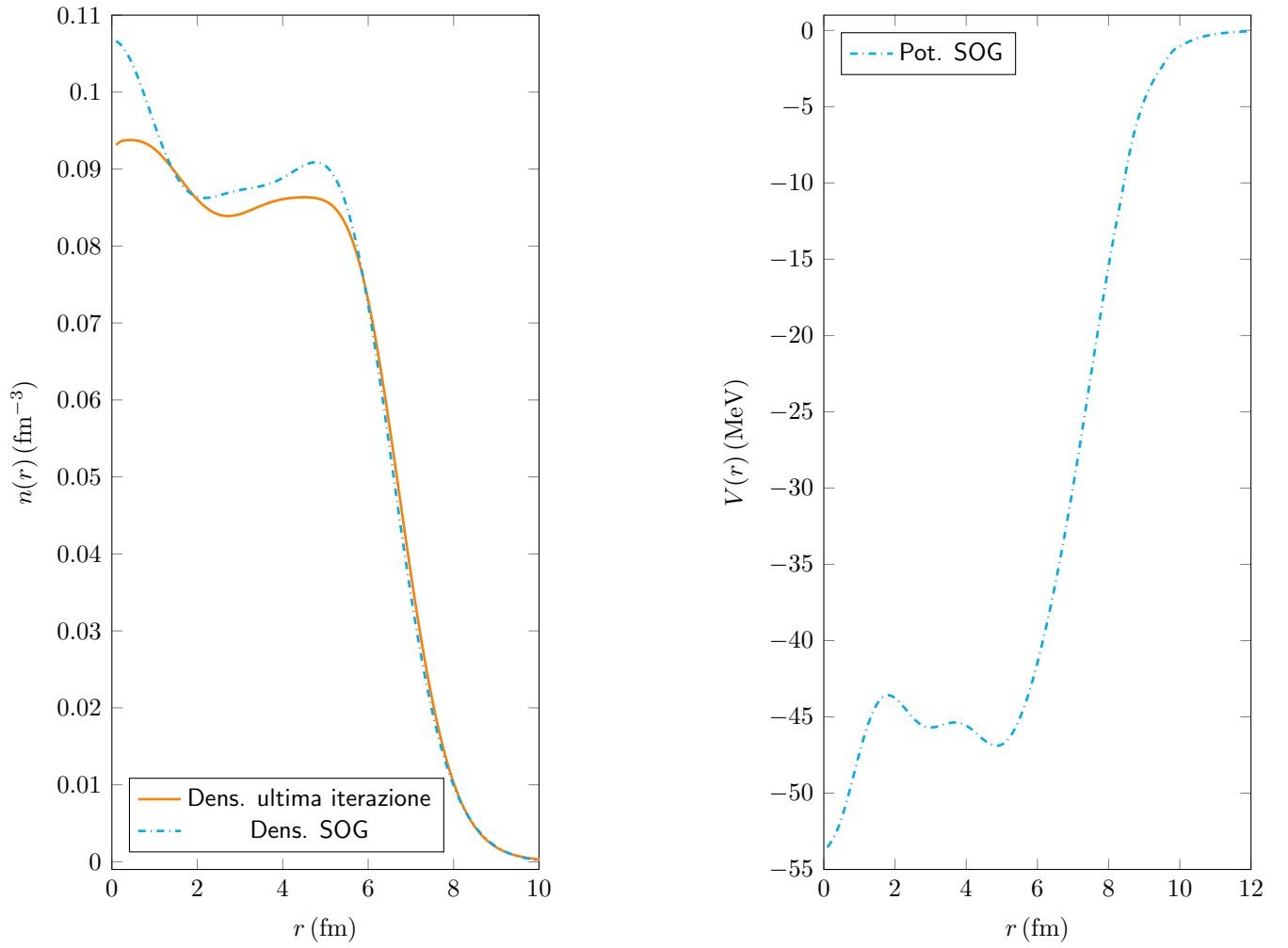


Figura 5.5: Densità (a sinistra) e potenziale nucleare (a destra) dei neutroni del Piombo 208.

5.1 Gli autovalori modificati dell'energia

Avendo ottenuto dei potenziali nucleari efficaci che si discostano almeno in parte da quello di Wood-Saxon utilizzato all'inizio del processo di inversione, è utile determinare i nuovi autovalori dei livelli energetici occupati da ciascun nucleone per i nuclei considerati. Questo confronto ci dà ulteriori informazioni su quanto sia accurato assumere il potenziale di Wood-Saxon come approssimazione per il potenziale nucleare. I dati sono stati riassunti nella **Tabella 5.1** e sono riferiti al solo caso dei protoni e per densità di target derivanti dalle simulazioni di esperimenti di scattering e dalla risoluzione del problema inverso di Kohn-Sham.

orb[¹⁶ O]	E_{WS} [MeV]	E_{new} [MeV]
1s	-27.10	-28.11
1p	-13.17	-15.38

orb[⁴⁰ Ca]	E_{WS} [MeV]	E_{new} [MeV]
1s	-30.88	-31.84
1p	-21.06	-22.93
1d	-10.22	-12.89
2s	-8.45	-10.80

orb[¹³² Sn]	E_{WS} [MeV]	E_{new} [MeV]
1s	-38.88	-40.70
1p	-33.84	-36.09
1d	-27.67	-30.25
2s	-25.17	-27.35
1f	-20.57	-23.44
2p	-17.07	-19.69
1g	-12.68	-15.86

orb[²⁰⁸ Pb]	E_{WS} [MeV]	E_{new} [MeV]
1s	-33.23	-35.84
1p	-29.66	-33.01
1d	-25.07	-28.87
2s	-22.60	-24.46
1f	-19.64	-23.72
2p	-16.15	-18.75
1g	-13.48	-17.75
2d	-9.24	-12.39
3s	-7.70	-11.082
1h	-6.67	-9.98

Tabella 5.1: Confronto tra gli autovalori dell'energia per il potenziale esterno di Wood-Saxon e per i potenziali nucleari determinati dal processo di inversione

Come mostrato nella **Tabella 5.1**, gli autovalori non vengono modificati significativamente. Per i nuclei leggeri la differenza è di circa 2–3 MeV, mentre per il ²⁰⁸Pb arriva fino a 5–6 MeV. In tutti i casi considerati, gli autovalori derivanti

dai potenziali efficaci determinati si trovano in livelli energetici più bassi rispetto a quelli ottenuti a partire dal potenziale di Wood-Saxon.

5.2 Analisi dei risultati

5.2.1 I fattori di forma

La differenza tra i fattori di forma sperimentali e di Fermi varia in modo regolare in base al nucleo scelto e al momento trasferito: in tutti i nuclei la differenza è minima per basso momento trasferito e diventa grande per valori maggiori di q . Inoltre l'accordo è molto buono per nuclei leggeri, mentre diventa meno marcato per il ^{208}Pb , rimanendo comunque ottimo. La differenza più grande è data dal fatto che i fattori di forma derivanti da densità parametrizzate presentano dei minimi più marcati rispetto a quelli sperimentali. Questo è dovuto al fatto che i fattori di forma sperimentali derivano da un calcolo molto realistico, fatto con la *Distorted Wave Born Approximation*, mentre quelli derivanti da parametrizzazioni sono stati calcolati con una trasformata di Fourier, il che equivale ad utilizzare la *Plane Wave Born Approximation*.

5.2.2 Le densità

La procedura utilizzata per ricavare le densità di nucleoni a partire dalle DCS sperimentali sembra fornire ottimi risultati, in quanto le densità ottenute risultano molto simili a quelle parametrizzate. In particolare per i nuclei leggeri quali il ^{16}O e il ^{40}Ca le densità protoniche risultano quasi completamente sovrapposte a partire da circa 2 fm, mentre per il ^{208}Pb questo accade a partire da circa 5 fm.

Rimane quindi il problema di determinare sperimentalmente in modo più accurato la densità nucleare per consentire, utilizzando il nostro metodo, di ricavare un potenziale nucleare efficace affidabile per tutti i valori di r al di sopra di 1 fm (limite teorico di applicabilità del nostro approccio).

5.2.3 I potenziali protonici

Come spiegato all'inizio, l'obiettivo principale del lavoro svolto è quello di determinare potenziali nucleari efficaci per alcuni nuclei in modo *model independent*.

I risultati ottenuti sembrano molto ragionevoli in quanto i potenziali risultanti sono molto simili a quelli derivanti da densità parametrizzate. In particolare le differenze maggiori si hanno per valori piccoli del raggio e valgono al più 4 MeV. Il comportamento a grandi distanze risulta invece ancora una volta molto simile. Questo suggerisce inoltre che le parametrizzazioni di Fermi e SOG siano ottime per approssimare il potenziale nucleare efficace.

La forma dei potenziali, in alcuni punti significativamente differenti da quelli di Wood-Saxon, confermano l'indipendenza dell'algoritmo di inversione dal potenziale iniziale e quindi la sua consistenza. Questo non è tuttavia valido per valori di r grandi nel ^{132}Sn e nel ^{208}Pb , in quanto le oscillazioni delle densità sperimentali hanno obbligato ad imporre piccole variazioni del potenziale e questo equivale ad imporre che il potenziale non si discosti significativamente da quello iniziale (di Wood-Saxon) durante processo iterativo descritto in precedenza.

5.2.4 I potenziali neutronici

Per quanto riguarda i neutroni, si è potuto applicare il processo di inversione solo al nucleo di ^{208}Pb , in quanto attraverso esperimenti di scattering protonico è stato possibile determinare dei parametri SOG 'estraendo' dalla densità totale di nucleoni quella di protoni [Zen+10]. In questo caso l'algoritmo di inversione è arrivato a convergenza dopo solo 20 iterazioni.

5.2.5 Il codice

Poiché tutto il lavoro è stato svolto computazionalmente, è utile commentare brevemente come ha lavorato il codice utilizzato. Per i nuclei più pesanti, come ci si aspetta, ogni iterazione è più lenta rispetto a quelli leggeri in quanto viene generato un numero maggiore di autofunzioni radiali con le quali calcolare la densità teorica.

Per quanto riguarda i due diversi metodi illustrati per costruire un nuovo potenziale ad ogni iterazione (capitolo 4), l'utilizzo unico dell'equazione (4.3.2) ha mostrato molti problemi, soprattutto per quanto riguarda i nuclei pesanti. Per questi è stato possibile raggiungere la convergenza soltanto a partire da densità parametrizzate (dopo svariati tentativi nella scelta dei parametri α e γ), men-

tre utilizzando delle densità sperimentali come target non è stato in alcun modo possibile far convergere l'algoritmo.

L'equazione (4.3.1) si è dimostrata al contrario ottima per la convergenza, riuscendo a portare sempre ad una forma ragionevole per i potenziali, con il solo svantaggio di essere più lenta. Ad esempio, per il ^{40}Ca parametrizzato Fermi il primo metodo porta a convergenza in circa 10 minuti, mentre il secondo in circa 15 minuti.

Per quanto riguarda la scelta dei pesi p_1 e p_2 nell'equazione (4.3.1), questi sono stati scelti in modo che ad ogni iterazione il potenziale non fosse modificato significativamente. Si è infatti osservato che piccole oscillazioni incontrollate, anche per pochi valori di r , indirizzano il processo di convergenza verso un potenziale sbagliato e ad ogni iterazione i problemi che si generano vengono sempre più accentuati dall'algoritmo invece che corretti.

Arrivati al termine di questo elaborato è opportuno riassumere il lavoro svolto per poi trarre delle conclusioni finali. Lo scopo che ci siamo posti all'inizio di questo percorso era di applicare la teoria del funzionale della densità al caso nucleare. Per far questo abbiamo utilizzato nuclei che possedessero un numero magico di protoni, in modo che fosse soddisfatta la condizioni di simmetria sferica. I nuclei sono stati scelti in modo da avere masse diverse, per poter testare la procedura in varie regioni della carta dei nuclidi.

Abbiamo quindi utilizzato il formalismo di Kohn e Sham per implementare un algoritmo che ci permettesse, attraverso le equazioni di inversione, di ottenere dei potenziali nucleari efficaci. Per testare il funzionamento di tale procedimento abbiamo quindi utilizzato densità provenienti da parametrizzazioni di Fermi e SOG.

Il punto fondamentale del lavoro è stato poi di riuscire a definire una procedura rigorosa che permettesse di ricavare, a partire da esperimenti di scattering elettronico, e quindi da sezioni d'urto differenziali, potenziali nucleari efficaci, senza la necessità di assumere una forma funzionale per la densità di protoni, come fatto abitualmente in letteratura.

I dati delle DCS sperimentali sono stati determinati con simulazioni di esperimenti di scattering. Questo procedimento ha il vantaggio di permetterci di capire quali dovranno essere i parametri di futuri esperimenti per poter ottenere buo-

ni risultati applicando la DFT al caso nucleare. Il risultato è stato che questi esperimenti dovranno essere fatti con energie di scattering di circa 1 GeV e fino ad angoli di 150° . I dati sperimentali che abbiamo provato ad utilizzare, con energie di 500 MeV si sono rivelati invece incapaci di permettere la convergenza dell'algoritmo di inversione.

L'unico punto della procedura utilizzata che potrebbe sembrare debole è il passaggio dal quadrato del fattore di forma al fattore di forma sperimentale. Tuttavia, come ampiamente dimostrato, questo passaggio può essere svolto con molta facilità senza che la scelta dei punti di inversione di segno modifichi significativamente il risultato finale.

Il procedimento utilizzato per ricavare potenziali nucleari di Kohn-Sham a partire da DCS sperimentali è quindi *model independent*, in quanto non utilizza alcun tipo di parametrizzazione per le densità. Per la prima volta sono stati quindi ottenuti potenziali nucleari a partire da esperimenti di scattering dall'applicazione della teoria del funzionale della densità e i risultati sono confrontabili con quelli ottenuti da metodi più noti come quello di Hartree-Fock (come confermato qualitativamente dalle figure 8-12 di [VB72]).

L'applicazione della DFT al problema inverso senza assumere una forma funzionale per la densità ha infine mostrato ottimi risultati per tutti i nuclei, da quelli più leggeri a quelli più pesanti, e il suo utilizzo potrà essere in futuro perfezionato per migliorare i risultati ottenuti, considerando ad esempio la possibilità di studiare anche nuclei deformati (per i quali non vale la condizione di simmetria sferica), nuclei dispari (in cui la densità di spin ricopre un ruolo importante) o includendo nell'equazione di Kohn-Sham una massa efficace per i nucleoni (dovranno essere aggiunti termini di gradiente della densità).

APPENDICE A

LA TRASFORMATTA DI FOURIER

Ricaviamo ora in simmetria sferica, a meno di una costante di normalizzazione, un'espressione per la densità che ci permette di utilizzare all'interno dell'integrale solo numeri reali.

$$\begin{aligned} n(\mathbf{r}) &= \int_{\Omega} d\mathbf{q} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{q}) = \\ &= \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{+\infty} dq \int_0^{\pi} d\theta q^2 \sin \theta e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} F(\mathbf{q}) = \end{aligned}$$

operiamo ora la seguente sostituzione: $x = \cos \theta \implies dx = -\sin \theta d\theta$

$$\begin{aligned} &= 2\pi \int_0^{+\infty} dq q^2 \int_{-1}^1 dx e^{iqr x} F(\mathbf{q}) = \\ &= 2\pi \int_0^{+\infty} dq q^2 \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{iqr} F(\mathbf{q}) = \end{aligned}$$

ed esplicitando la funzione trigonometrica: $\sin qr = \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2iqr}$

$$\begin{aligned} &= 4\pi \int_0^{+\infty} dq q^2 \frac{\sin qr}{qr} F(\mathbf{q}) = \\ &= 4\pi \int_0^{+\infty} dq q \frac{\sin qr}{r} F(\mathbf{q}) \end{aligned}$$

Poiché lavoriamo in simmetria sferica, possiamo passare dai vettori ai loro moduli nell'argomento della densità e del fattore di forma. Otteniamo allora l'equazione finale

$$n(r) = 4\pi \int_0^{+\infty} dq \, q \frac{\sin qr}{r} F(q)$$

APPENDICE B

IL MOMENTO TRASFERITO

Determiniamo un'espressione per determinare il momento trasferito q . Consideriamo il vettore d'onda $\mathbf{k}_i$ incidente e quello $\mathbf{k}_f$ finale. Per il momento trasferito varrà l'espressione

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$$

Elevando al quadrato e passando ai moduli

$$q^2 = k_i^2 + k_f^2 - 2k_i k_f \cos \theta$$

Eguagliamo ora il modulo del vettore d'onda incidente con quello del vettore trasferito e li chiamiamo entrambi k

$$q^2 = 2k^2(1 - \cos \theta) = 4k^2 \sin^2 \theta/2$$

dove l'uguaglianza tra le parti trigonometriche deriva dalle identità

$$1 = \sin^2 \frac{\theta}{2} + \cos^2 \frac{\theta}{2} \quad \cos \theta = \cos^2 \frac{\theta}{2} - \sin^2 \frac{\theta}{2}$$

Segue quindi che

$$q = 2k \sin \theta/2$$

Per trovare k ci mettiamo nel caso relativistico: $E = pc = k\hbar c$. Si ha quindi $k = E/(\hbar c)$. Otteniamo allora l'espressione finale

$$q = \frac{2E}{\hbar c} \sin \frac{\theta}{2}$$

APPENDICE C

LE AUTOFUNZIONI RADIALI

Sono qui presentati i risultati relativi al calcolo delle autofunzioni radiali per i nucleoni dei nuclei di ^{16}O , ^{40}Ca e ^{208}Pb .

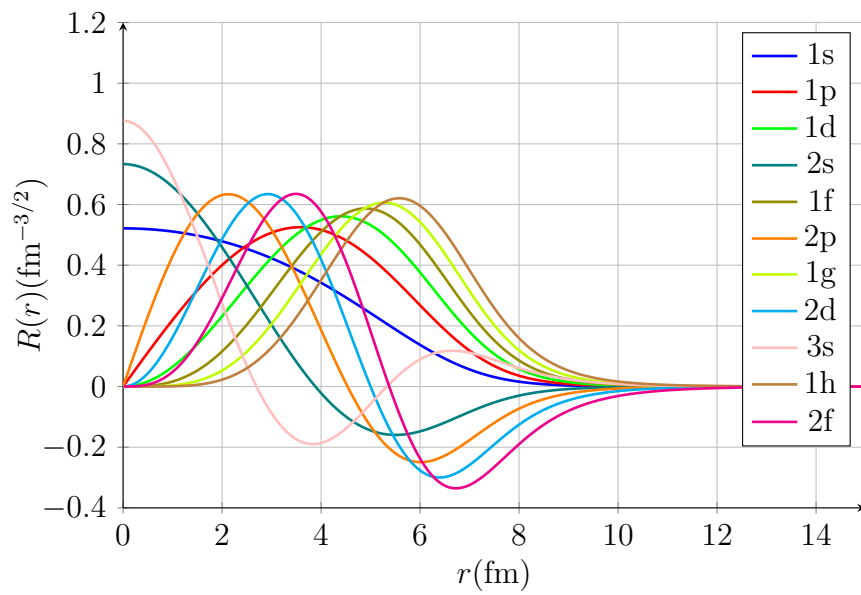


Figura C.1: Autofunzioni radiali per i protoni del piombo ^{208}Pb

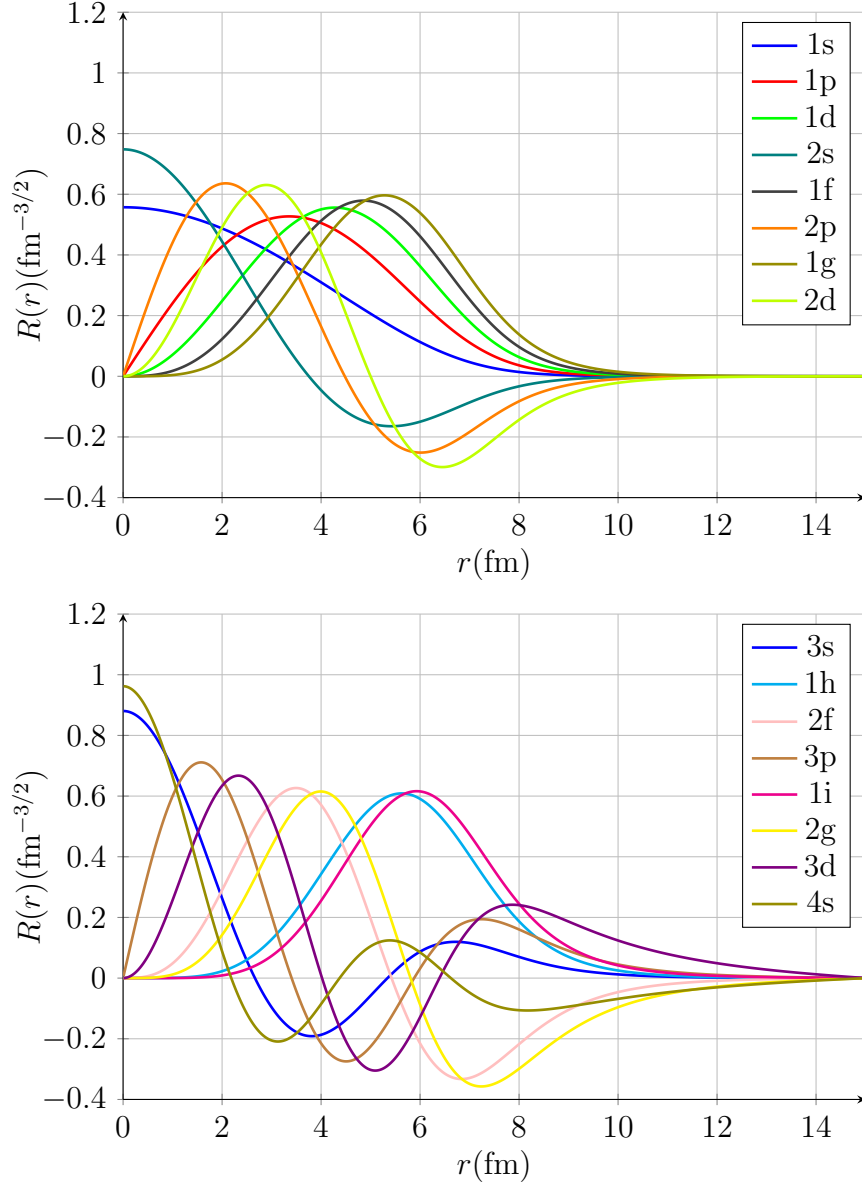


Figura C.2: Autofunzioni radiali per i neutroni del piombo ^{208}Pb

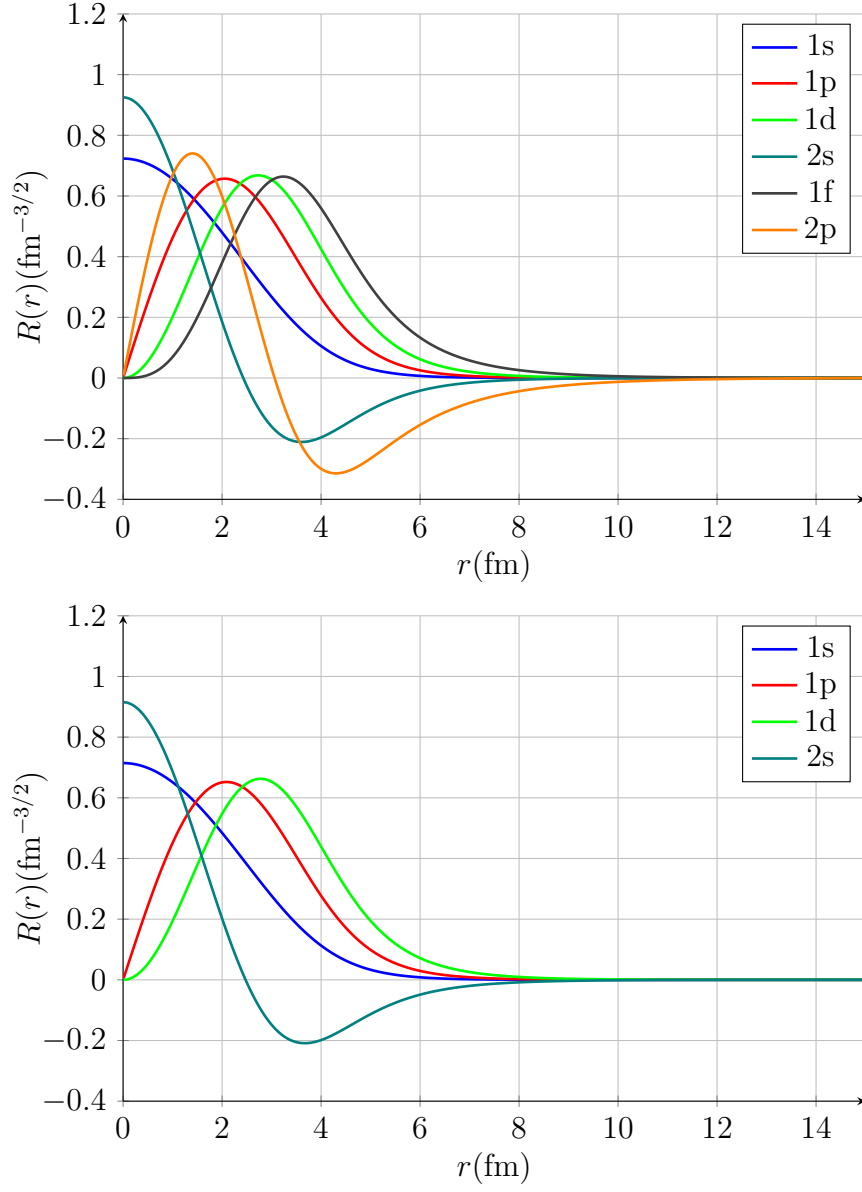


Figura C.3: Autofunzioni radiali per i neutroni (pannello superiore) e i protoni (pannello inferiore) del calcio ^{40}Ca

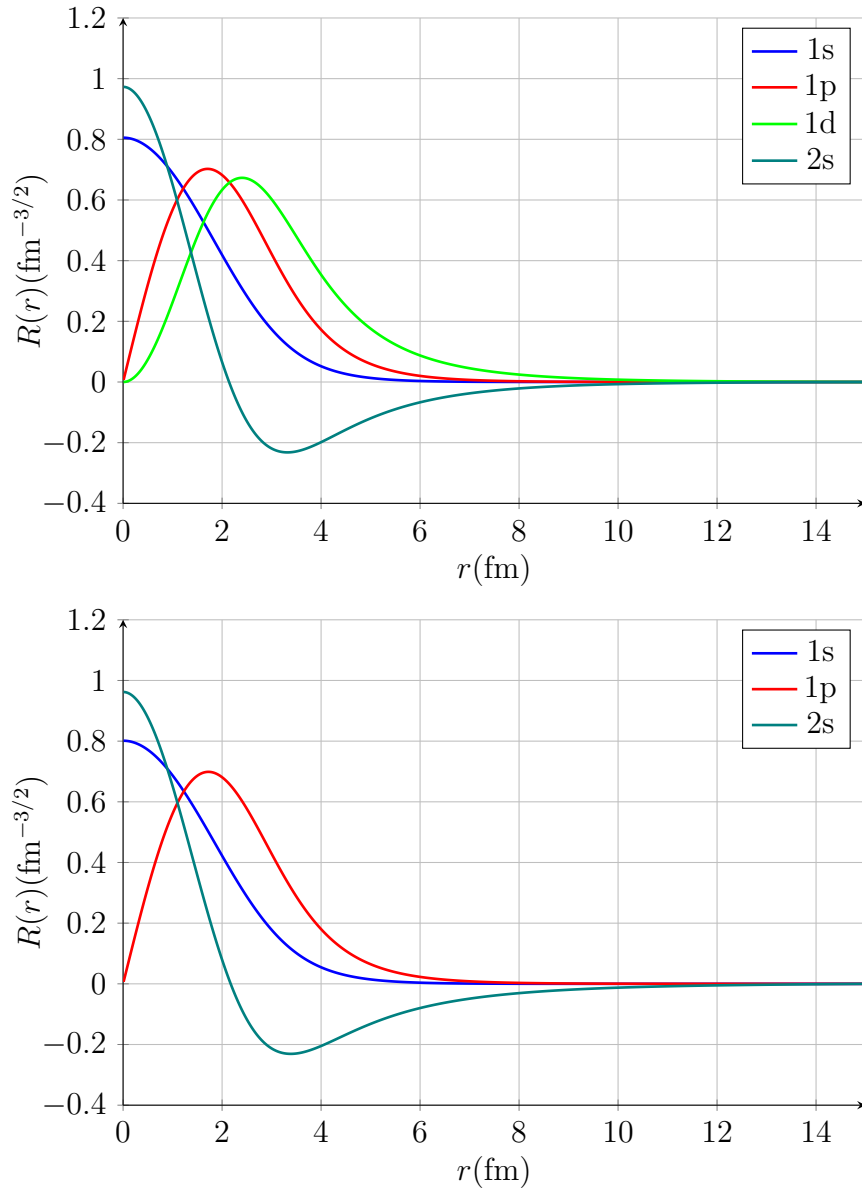


Figura C.4: Autofunzioni radiali per i neutroni (pannello superiore) e i protoni (pannello inferiore) dell'ossigeno ^{16}O

BIBLIOGRAFIA

- [Acc17] Giacomo Accorto. «A Constrained-Minimization Method for the Solution of the Inverse Kohn-Sham Problem in Nuclei». In: (2017).
- [const18] *Universal Physical Constants*. 2018. URL: <https://physics.nist.gov/cuu/Constants/>.
- [Cue17] Nicolle Martinez Cuenca. «Deduzione di potenziale medio e massa efficace dei nucleoni dalle densità nucleari». In: (2017).
- [HK64] P. Hohenberg e W. Kohn. «Inhomogeneous Electron Gas». In: *Physical Review* 136.3B (nov. 1964), pp. 864–871.
- [Hof56] Robert Hofstadter. «Electron Scattering and Nuclear Structure». In: *Reviews of Modern Physics* 28.3 (lug. 1956), pp. 214–254.
- [JW17] Daniel S. Jensen e Adam Wasserman. «Numerical methods for the inverse problem of density functional theory». In: *Wiley Chemistry Journal* (giu. 2017).
- [KS65] W. Kohn e L. J. Sham. «Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects». In: *Physical Review* 140.4A (giu. 1965), pp. 1133–1138.
- [LB94] R. van Leeuwen e E. J. Baerends. «Exchange-correlation potential with correct asymptotic behavior». In: *Physical Review A* 49.4 (apr. 1994), pp. 2421–2431.

- [Mac15] Iuri Macocco. «Costruzione del potenziale nucleare efficace di Kohn-Sham dalle densità empiriche». In: (2015).
- [math12] *Wolfram Alpha*. 2012. URL: <http://www.wolfram.com/mathematica/>.
- [Por16] Andrea Porro. «Potenziali nucleari da densità e distribuzioni di spin microscopiche». In: (2016).
- [Roc+08] X. Roca-Maza et al. «Theoretical study of elastic electron scattering off stable and exotic nuclei». In: *Physical Review C* 78.4 (ott. 2008).
- [root18] *ROOT Data Analysis Framework*. 2018. URL: <https://root.cern.ch>.
- [SJP05] Francesc Salvat, Aleksander Jablonski e Cedric J. Powell. «Dirac partial-wave calculation of elastic scattering of electrons and positrons by atoms, positive ions and molecules». In: *Computer Physics Communications* 165.2 (gen. 2005), pp. 157–190.
- [VB72] D. Vautherin e D. M. Brink. «Hartree-Fock Calculations with Skyrme’s Interaction. I. Spherical Nuclei». In: *Physical Review C* 5.3 (mar. 1972), pp. 626–647.
- [VJV87] H. De Vries, C. W. De Jager e C. De Vries. «Nuclear Charge-Density-Distribution Parameters from Elastic Electron Scattering». In: *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 36.3 (mag. 1987), pp. 495–536.
- [Zen+10] J. Zenihiro et al. «Neutron density distributions of $^{204,206,208}\text{Pb}$ deduced via proton elastic scattering at $E_p = 295\text{ MeV}$ ». In: *Physical Review C* 82 (ott. 2010).